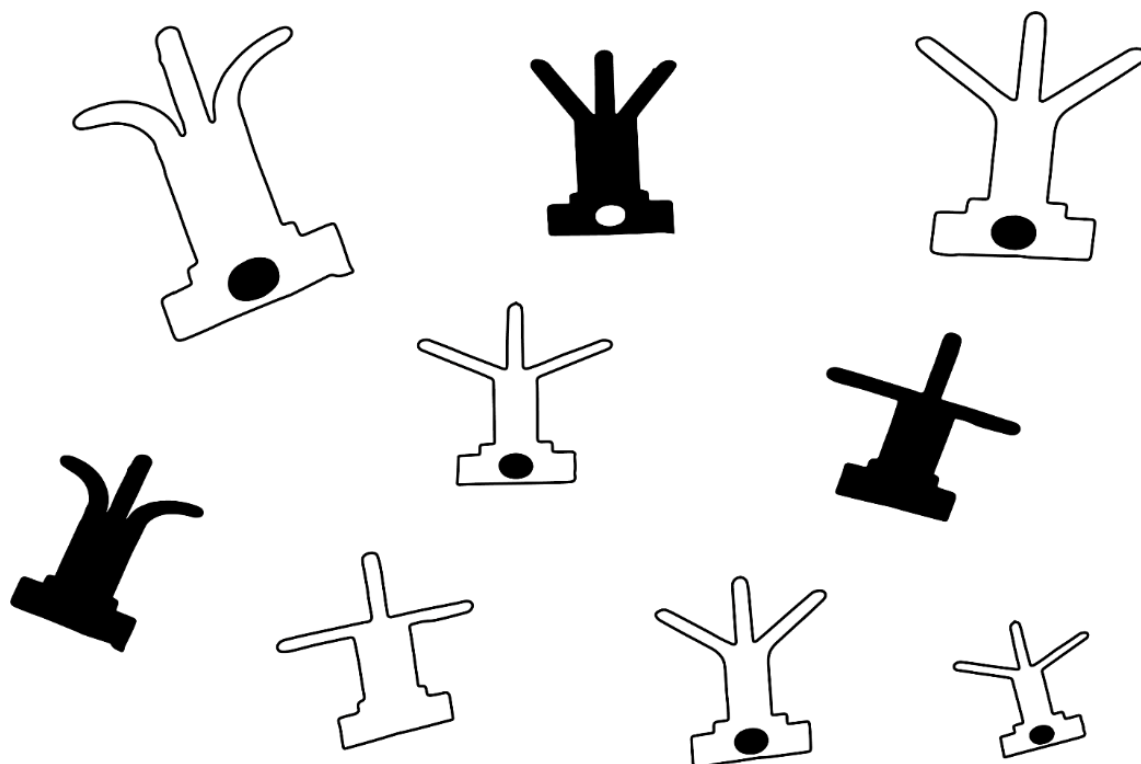




UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA  
BARCELONATECH

Escola Superior d'Enginyeries Industrial,  
Aeroespacial i Audiovisual de Terrassa



**Centre universitari:** Escola Superior d'Enginyeries Industrial, Aeroespacial i Audiovisual de Terrassa (ESEIAAT)

**Titulació:** Grau en Enginyeria Mecànica

**Alumne/a:** Fernández Faya, Pau

**Enunciat TFG:** Estudi i optimització de la morfologia d'un sensor de pH basat exclusivament en paper

**Director/a del TFG:** Casals Terré, Jasmina

**Co-director/a del TFG:** López Martínez, Joan Antoni

**Convocatòria de lliurament del TFG:** 30 de Juny de 2020

## Índex de continguts

1.	Introducció .....	1
2.	Objectiu de l'estudi .....	2
2.1	Abast de l'estudi .....	2
2.2	Planificació de l'estudi. Diagrama de Gantt.....	5
3.	Estat de l'art.....	6
3.1	Ús del paper en estudis microfluídics per l'anàlisi de pH. Estudis previs.....	6
3.2	Funcionament del sensor de paper. Mesurament del pH i amplada de difusió. 7	7
3.3	Ús de màquina làser per l'obtenció dels sensors de pH.....	9
4.	Instrumentació per la realització dels experiments.....	12
4.1	Equip necessari .....	12
4.1.1	Paper normalitzat <i>Whatman (GE Healthcare Life Sciences)</i> .....	12
4.1.2	Pinces de subjecció .....	12
4.1.3	Ordinador portàtil.....	12
4.1.4	Màquina de tall làser CNC <i>BCN3D Ignis</i> (FabLab Terrassa) .....	13
4.1.5	Màquina de tall làser d'ús domèstic: <b>NEJE 7000mW</b> .....	14
4.1.6	Màquina d'impressió 3D d'ús domèstic: <b>ZORTRAX M200</b> .....	14
4.1.7	Micropipetes de dosi controlada .....	14
4.1.8	Fluids de pH conegut i colorant.....	15
4.1.9	Microscopi <i>DinoLite</i> .....	15
4.1.10	Mecanisme de sincronització dels reactius .....	16
4.1.11	Planxa dels sensors.....	16
4.2	Softwares utilitzats.....	17
4.2.1	SolidWorks .....	17
4.2.2	RDWorks V 8.0.....	17
4.2.3	DinoCapture .....	17
4.2.4	ANSYS Fluid Flow Fluent (FFF).....	18
4.2.5	CATIA V5 .....	18
5.	Metodologia de treball.....	19
6.	Anàlisi del mecanisme d'accionament manual.....	22
6.1	Descripció del mecanisme d'accionament .....	22
6.2	Avantatges i inconvenients del mecanisme actual .....	23
6.3	Millores aplicades al mecanisme de sincronització durant la realització de l'estudi.....	24
7.	Càlculs d'Ansys Fluent. <i>Grid Independency Analysis</i> .....	28

7.1	<i>Grid Independency Analysis</i> .....	28
7.2	Càlculs del codi CFD d'Ansys Fluent .....	33
8.	Obtenció dels coeficients de simulació. ....	43
9.	Anàlisi dels resultats .....	51
9.1	Simulacions amb <i>Ansys Fluent</i> .....	51
9.2	Comportament dels sensors de paper – Proves experimentals .....	59
10.	Salut, Sostenibilitat i Medi Ambient .....	71
11.	Conclusions de l'estudi i altres vies d'investigació .....	73
11.1	Conclusions de l'estudi .....	73
11.2	Estudis futurs.....	77
12.	Bibliografia .....	82
12.1	Referències bibliogràfiques citades .....	82
12.2	Referències bibliogràfiques consultades.....	83
13.	Webgrafia.....	85

## Índex d'il·lustracions

Il·lustració 1: Diagrama bàsic de la distinció del pH d'una substància en funció del color adoptat – <b>Font:</b> <a href="https://www.pinterest.es/pin/55098795429208019/">https://www.pinterest.es/pin/55098795429208019/</a> .....	6
Il·lustració 2: Sensor v7 amb conductes laterals inclinats 45° respecte el central després de realitzar una prova de fluid amb aigua i colorant alimentari. Sincronització òptima – <b>Font:</b> Autor .....	7
Il·lustració 3: El fenomen de difusió s'il·lustra gràficament a la imatge, on la substància de pH desconegut i la de pH conegut circulen a través del conducte esquerre i dret respectivament. Pel conducte central circula el reactiu (colorant), amb el qual s'aconsegueix el gruix de difusió desitjat – <b>Font:</b> Autor .....	9
Il·lustració 4: Tallat làser del paper normalitzat Whatman N° 05 amb la màquina BCN3D Ignis del FabLab Terrassa – <b>Font:</b> Autor .....	11
Il·lustració 5: Caixa d'emmagatzematge del paper normalitzat Whatman N° 05, junt amb un cercle de paper Whatman N°05 de diàmetre 110 mm usat per l'obtenció dels sensors - <b>Font:</b> Autor .....	12
Il·lustració 6: Pines de subjecció utilitzades en el posicionat dels sensors de paper al mecanisme d'accionament – <b>Font:</b> Autor .....	12
Il·lustració 7: Màquina BCN3D Ignis del FabLab Terrassa – <b>Font:</b> Autor .....	13
Il·lustració 8: Protector per les puntes de les micropipetes usades a les proves experimentals – <b>Font:</b> Autor .....	14
Il·lustració 9: Una de les proves inicials de l'estudi amb aigua i colorant blau com a fluid. Mecanisme 2S_DEVICE_H01 – <b>Font:</b> Autor .....	15
Il·lustració 10: Microscopi DinoLite utilitzat en els experiments amb els sensors i diferents fluids – <b>Font:</b> Autor .....	15
Il·lustració 11: Mecanisme d'accionament 3S_DEVICE_H01_1 en una de les proves inicials de l'estudi – <b>Font:</b> Autor .....	16
Il·lustració 12: Planxes especialitzades en el planxat de paper (planxat en fred) utilitzades prèviament a la realització de les proves experimentals – <b>Font:</b> López Martínez, Joan Antoni .....	16
Il·lustració 13: Modelat d'un sensor amb croquis 2D a SolidWorks – <b>Font:</b> Autor .....	17
Il·lustració 14: Configuració de les velocitats de tall i dels offsets de posició al RDWorks V 8.0 – <b>Font:</b> Autor .....	17
Il·lustració 15: Presa de dimensions d'un sensor v2 amb DinoCapture – <b>Font:</b> Autor .....	17
Il·lustració 16: Gràfic de color de la velocitat del fluid (aigua) sobre la superfície del sensor v2. Simulacions inicials amb Ansys FFF – <b>Font:</b> Autor .....	18
Il·lustració 17: Conjunt de 3 imatges reescalades per mitjà del software CATIA V5 – <b>Font:</b> López Martínez, Joan Antoni .....	18
Il·lustració 18: Esquema general del protocol seguit en el testeig dels dispositius de mesura – <b>Font:</b> Autor .....	21
Il·lustració 19: Mecanisme definitiu de sincronització pels sensors amb les parts integrants numerades (6S_DEVICE_H01_6) – <b>Font:</b> Autor .....	22
Il·lustració 20: Vista "explosionada" del mecanisme de sincronització 5S_DEVICE_H01_5, amb les principals parts destacades – <b>Font:</b> López Martínez, Joan Antoni .....	23
Il·lustració 21: Gràfic que mostra l'evolució del valor de caiguda de pressió màxim calculat vers el nombre total de cel·les discretitzades – Grid Independency Analysis – <b>Font:</b> Autor .....	30

Il·lustració 22: Boundary Conditions nomenades durant la realització del mallat per les diferents simulacions (es presenta un cas particular d'un sensor v7 a 45°) – <b>Font:</b> Autor .....	32
Il·lustració 23: Exemple il·lustratiu de l'aplicació de la conservació de la massa per un fluid que travessa en direcció transversal un medi porós – <b>Font:</b> Dr. Aidan Wimshurst – <b>Adaptat per:</b> Autor .....	33
Il·lustració 24: Exemple il·lustratiu per l'explicació del terme U, corresponent a la velocitat del front del fluid – <b>Font:</b> Dr. Aidan Wimshurst – <b>Adaptat per:</b> Autor .....	35
Il·lustració 25: Exemple il·lustratiu per l'explicació de la diferència entre U i $U_s$ – <b>Font:</b> Dr. Aidan Wimshurst – <b>Adaptat per:</b> Autor .....	36
Il·lustració 26: Exemple il·lustrat d'un quadrat 4x4 de les cel·les d'un mallat. Representades en fons blau i encerclades en vermell un conjunt de 2 cel·les en zona porosa – <b>Font:</b> Dr. Aidan Wimshurst – <b>Adaptat per:</b> Autor .....	37
Il·lustració 27: Exemple il·lustratiu del gruix de la zona porosa a travessar pel fluid, el qual depèn de la direcció que aquest tingui – <b>Font:</b> Dr. Aidan Wimshurst – <b>Adaptat per:</b> Autor .....	39
Il·lustració 28: Vista en planta del model CAD pel sensor v7 amb conductes laterals inclinats 45° al workbench d'Ansys Fluent SpaceClaim – <b>Font:</b> Autor .....	41
Il·lustració 29: Mesura de la posició del front de flux amb ImageJ – <b>Font:</b> Autor .....	43
Il·lustració 30: Taula amb els diferents valors de la viscositat dinàmica de l'aigua en funció de la seva temperatura. Destacada en vermell la viscositat dinàmica de l'aigua a 20 °C – <b>Font:</b> <a href="http://www.vaxasurface.com">www.vaxasurface.com</a> .....	44
Il·lustració 31: Línia de tendència de caràcter lineal graficada a partir dels valors de velocitat a la zona d'intersecció extrems de les simulacions d'Ansys Fluent - <b>Font:</b> Autor .....	54
Il·lustració 32: <b>a)</b> Diagrama de contorns de la velocitat del front de flux per un sensor v7 a 90° on s'observen les zones mortes aparegudes als vèrtexs entre conductes, amb velocitat 0. <b>b)</b> Diagrama de contorns de la difusió d'UDS per un sensor v7 a 90°, on es produeix la difusió del colorant central cap als conductes laterals degut al decreixement de la velocitat del front, provocant una major distància d'estabilització de la difusió a la zona central del dispositiu – <b>Font:</b> Autor .....	55
Il·lustració 33: Comparativa de les velocitats obtingudes per un sensor v7 amb conductes inclinats a 45° de diferent gruix. <b>a)</b> Inlets de 2,5 mm i <b>b)</b> Inlets de 3 mm – <b>Font:</b> Autor .....	55
Il·lustració 34: Comparació de la concentració i amplada de la difusió generada a mesura que s'augmenta la secció dels conductes d'entrada, observant-se la invariabilitat de la concentració – <b>Font:</b> Autor .....	56
Il·lustració 35: Comparació de la concentració i amplada de difusió generada per diferents angles d'inclinació dels conductes laterals, observant-se la relació inversament proporcional existent entre els factors – <b>Font:</b> Autor .....	57
Il·lustració 36: Tendència seguida per l'amplada de difusió a la zona central del dispositiu de mesura en funció de l'angle d'inclinació dels conductes laterals d'entrada – <b>Font:</b> Autor .....	58
Il·lustració 37: Diagrama de les línies de flux seguides pel front, on s'indica la velocitat seguida per aquest – <b>Font:</b> Autor .....	59
Il·lustració 38: Línia de tendència mostrada per la velocitat del front de flux respecte la caiguda de pressió – <b>Font:</b> Autor .....	60
Il·lustració 39: Gràfics obtinguts a partir del post processat de les dades extrems a partir de les proves del laboratori, on s'observa la proporcionalitat existent entre les variables de velocitat i caiguda de pressió respectivament – <b>Font:</b> Autor .....	61

Il·lustració 40: Caigudes de pressió i moviment del front de flux al llarg dels conductes del sensor A017, el qual ha mostrat sincronització dels fluxos en arribar a la zona d'intersecció – <b>Font:</b> Autor .....	62
Il·lustració 41: Sincronització obtinguda amb variants d'inclinació pel sensor v7 per 30°, 60° i 90° respectivament – <b>Font:</b> Casals Terré, Jasmina .....	63
Il·lustració 42: Gràfics de l'amplada de difusió obtinguts a partir de les proves de laboratori dels sensors A017 i A019 respectivament – <b>Font:</b> Autor.....	64
Il·lustració 43: Difusió entre els reactius de les proves realitzades al laboratori per sensors v7 inclinats a 30°, 60° i 90° respectivament – <b>Font:</b> López Martínez, Joan Antoni – <b>Adaptat:</b> Autor.....	66
Il·lustració 44: Anàlisi de la difusió únicament tenint en compte la mescla entre colorants groc i blau, a la banda dreta del substrat – <b>Font:</b> López Martínez, Joan Antoni – <b>Adaptat:</b> Autor .....	67
Il·lustració 45: Fotografies realitzades amb mòbil exportades per al seu escalat a CATIA, fent possible la seva comparació directa en quant a l'amplada de difusió obtinguda per inclinacions de 30°, 60° i 90° respectivament – <b>Font:</b> López Martínez, Joan Antoni – <b>Adaptat:</b> Autor.....	68
Il·lustració 46: Perfil RGB generat amb ImageJ a partir de 3 fotografies consecutives presentades a la il·lustració anterior, corresponents a la difusió entre reactius per 30°, 60° i 90° d'inclinació respectivament – <b>Font:</b> López Martínez, Joan Antoni – <b>Adaptat:</b> Autor .....	69
Il·lustració 47: Tendència mostrada per l'amplada de difusió en funció de l'angle d'inclinació dels conductes laterals obtinguda a través de les proves experimentals realitzades amb dispositius de mesura inclinats a 30, 60 i 90 graus – <b>Font:</b> López Martínez, Joan Antoni – <b>Adaptat:</b> Autor .....	70
Il·lustració 48: Curvatures presents en la difusió generada sobre la zona central del dispositiu A019 – <b>Font:</b> Autor .....	76
Il·lustració 49: Disseny de dipòsit el qual disposa de tapes microperforades per la propagació homogènia dels reactius – <b>Font:</b> Autor .....	78
Il·lustració 50: Asincronisme mostrat per un sensor amb conductes laterals inclinats respecte del cental en una de les proves realitzades – <b>Font:</b> López Martínez, Joan Antoni .....	80

## Índex de taules

Taula 1: Diagrama de Gantt de l'estudi – <b>Font:</b> Autor.....	5
Taula 2: Avantatges i inconvenients del paper normalitzat en estudis micro-fluídics – <b>Font:</b> Autor.....	6
Taula 3: Avantatges i inconvenients de l'ús de màquina de tall làser per l'obtenció dels sensors de pH – <b>Font:</b> Autor .....	10
Taula 4: Numeració i descripció de les peces integrants del mecanisme 6S_DEVICE_H06 – <b>Font:</b> Autor .....	22
Taula 5: Avantatges i inconvenients del mecanisme de sincronització actual pels sensors – <b>Font:</b> Autor .....	23
Taula 6: Principals característiques i inconvenients trobats en els 6 mecanismes de sincronització dissenyats i fabricats al llarg de l'estudi – <b>Font:</b> Autor.....	27
Taula 7: Valors de caiguda de pressió obtinguts a partir de la realització de l'anàlisi per quadrícules desenvolupat amb Ansys Fluent – <b>Font:</b> Autor .....	29
Taula 8: Evolució de la malla i els resultats obtinguts de caiguda de pressió al llarg de la resolució de la Grid Independency Analysis – <b>Font:</b> Autor .....	31
Taula 9: Funció dins el codi CFD de les diferents condicions limitants de contorn insertades per la resolució del model – <b>Font:</b> Autor.....	32
Taula 10: Dimensions generals del sensor v7 amb conductes laterals inclinats 45°, el qual ha mostrat repetibilitat en els experiments realitzats al laboratori – <b>Font:</b> Autor..	51
Taula 11: Gràfics definitius obtinguts pel sensor v7 amb inclinació de 45° dels conductes laterals vers el central de les 3 variables d'estudi principals: pressió, velocitat i UDS – <b>Font:</b> Autor.....	52
Taula 12: Evolució de l'augment de velocitat que es produeix a la zona d'intersecció a mesura que augmenta l'angle d'inclinació dels conductes laterals – <b>Font:</b> Autor.....	53
Taula 13: Evolució de l'amplada de difusió adoptada a la zona central del substrat a mesura que augmenta l'angle d'inclinació dels conductes laterals – <b>Font:</b> Autor.....	58
Taula 14: Referència utilitzada a l'hora de diferenciar els conductes d'entrada dels dispositius de mesura – <b>Font:</b> Autor .....	62
Taula 15: Mitjana de l'amplada de difusió obtinguda amb els diferents angles d'inclinació dels conductes laterals – <b>Font:</b> López Martínez, Joan Antoni – <b>Adaptat:</b> Autor .....	69



## Índex d'equacions

Equació 1: Llei de difusió de Fick.....	7
Equació 2: Càlcul de l'error relatiu per l'optimització del mallat – <b>Font:</b> (Cfd, 2018)....	29
Equació 3: Continuitat i conservació de la massa .....	33
Equació 4: Expressió polinòmica d'ordre N amb la qual es pot parametritzar la caiguda de pressió soferta per un fluid, coneixent la velocitat amb la qual circula aquest .....	34
Equació 5: Llei de Darcy expressada en forma de <b>dynamic head</b> .....	34
Equació 6: Equacions de Navier-Stokes aplicades a un sistema macroscòpic.....	37
Equació 7: Llei de Darcy en la seva forma vectorial, expressada per l'eix X de difusió.....	38
Equació 8: Força aplicada sobre el fluid amb motiu de les forces capil·lars generades pel substrat .....	38
Equació 9: Source Term <b>S</b> afegit a les equacions de Navier-Stokes per part del codi CFD per tal de comptabilitzar la caiguda de pressió generada pel substrat de paper, tenint en compte el volum de cel·la .....	39
Equació 10: Source Term <b>S</b> amb el gruix del substrat multiplicat per cadascun dels termes lineal i quadràtic .....	39
Equació 11: Llei de Darcy aplicada per medis porosos, expressada per l'eix X de difusió .....	40
Equació 12: Comparació de la Llei de Darcy amb el terme lineal de l'expressió polinòmica de la caiguda de pressió, referent les forces viscoses.....	40
Equació 13: Velocitat del front del flux al llarg de l'eix X de difusió.....	44
Equació 14: Equació de Darcy per medis porosos a partir del cabal volumètric del fluid .....	44
Equació 15: Llei de Darcy Forchheimer, aplicada per medis porosos .....	45
Equació 16: Expressió del diàmetre hidràulic aplicada per l'equació de Kozeny-Carman .....	46
Equació 17: Equació de Poiseuille expressada en funció del diàmetre hidràulic.....	46
Equació 18: Equació de Poiseuille, substituint el diàmetre hidràulic presentat anteriorment .....	47
Equació 19: Equació de Kozeny-Carman modificada – <b>Font:</b> (Yazdchi et al., 2011)...	47
Equació 20: Equació pel factor de forma CK.....	47
Equació 21: Equació de Kozeny-Carman modificada, aplicant el factor geomètric i la tortuositat del substrat.....	48
Equació 22: Equació de Kozeny-Carman modificada, amb el paràmetre característic del substrat K aïllat.....	49
Equació 23: Expressió per al càlcul de la porositat per medis porosos – <b>Font:</b> (Tanpichai et al., 2019).....	49





## Agraïments

En primer lloc, m'agradaria agrair als meus tutors/es de TFG, la Jasmina Casals Terré i en Joan Antoni López Martínez per al seguiment continuat que han fet al llarg del meu estudi, destacant sobretot el moment en què es va decretar l'estat d'alarma a l'estat espanyol en motiu de la pandèmia de la COVID-19.

Des del primer moment em vaig sentir acollit a l'equip del MicroTech Lab Dept. de l'ESEIAAT i em van prestar el material i instal·lacions necessàries per al desenvolupament del meu estudi. S'han mostrat sempre disponibles en la resolució de qualsevol dubte en pro de la qualitat d'aquest estudi, així com m'han permès participar en la meua primera publicació de caire científic a l'article (*MicroTAS2020\_AbstractTemplate\_PaperBased Microfluidics*, n.d.), en el qual es destaquen els aspectes més destacats d'aquest estudi.

M'agradaria també donar les gràcies al Javier Hernández, cap del taller del FabLab Terrassa, per ajudar-me en els talls làser realitzats al llarg de l'estudi i donant-me consells per tal d'optimitzar la meua feina.

Agrair també al Departament d'Enginyeria Paperera i Gràfica la disponibilitat mostrada a l'hora d'utilitzar equip especialitzat per al planxat dels sensors de paper, així com a l'hora de cedir valors característics del substrat del paper emprat. A més, agrair a en Pouya Mehdrel el suport donat a l'estudi, realitzant proves experimentals al laboratori de la universitat quan l'accés a l'ESEIAAT no estava permès per gran part de l'estudiantat.

Per últim, donar les gràcies a família i amics pel suport mostrat al llarg de l'estudi, i els ànims rebuts sobretot durant la realització d'aquest estudi en les primeres fases del confinament sofert durant la pandèmia de la COVID-19.

## Abstract

This study focuses on the fabrication of a pH sensor made out exclusively of paper, which allows to detect the pH for different substances with repetitivity, obtaining reliable results. The study also includes the final design of the sensor positioning mechanism, which allows a synchronized delivery of the reagents to the sensor surface.

*Ansys Fluent* software is used in order to analyze the diffusion of  $H^+$  species on the substrate and the best substrate design to achieve accurate measurements. Fick's diffusion law and Navier-Stokes equations are solved by the CFD code, which is used by Ansys to perform the calculations.

Finally, by image analysis of the sensor performance at the laboratory, the diffusion profile data is extracted by *ImageJ* software. The simulations are validated with the experimental results.

## Resum

El present estudi es centra en la fabricació d'un sensor de pH basat exclusivament en paper que permeti detectar el valor de pH de diverses substàncies de manera repetitiva i confiable així com la seva concentració. L'estudi també engloba el disseny d'un model definitiu de mecanisme manual que permeti la deposició sincronitzada dels reactius a la superfície del sensor, dotant a l'experiment de la repetibilitat requerida.

S'usa el programari *Ansys Fluent* per analitzar la difusió de l'ió  $H^+$  en el substrat i així millorar el disseny d'aquest per aconseguir resultats més acurats. Les equacions de difusió de Fick i de Navier-Stokes es resolen per mitjà del codi CFD el qual és utilitzat per *Ansys* a l'hora de realitzar els càlculs.

Finalment, a través de l'anàlisi dels diferents experiments realitzats, s'extreu informació basada en píxels de color (perfil RGB) a través d'*ImageJ*. El model de simulació es valida a partir dels resultats experimentals obtinguts al laboratori.

## Motivació personal

Sempre he tingut la percepció de què l'enginyeria estava relacionada amb el món industrial i de l'automoció, i més havent cursat el Grau en Enginyeria Mecànica, però considero que a l'enginyeria no se l'ha d'empresonar en cap camp en concret i que pot aplicar-se allà on se la necessiti.

Concretament, en el sector bio-mèdic i d'investigació científica, crec que l'enginyeria pot ser de gran ajut a l'hora de dur a terme assajos de caràcter experimental i poder obtenir resultats reveladors en pro de l'estudi que s'estigui portant a terme.

És per aquest motiu pel qual vaig estar interessat en realitzar el present estudi, el qual permet l'obtenció amb precisió del pH d'un fluid a partir de paper, de manera que es tracta d'un experiment reproducible a pràcticament qualsevol país del món.

Destacar que el present estudi pot aplicar-se en altres camps, com ara l'anàlisi d'orina i sang, amb la consegüent detecció d'infeccions i altres problemes de salut.

Per últim, el caràcter experimental de l'estudi, així com la possibilitat de poder realitzar diferents proves de tall làser, fan que es tracti d'un projecte en el qual pugui participar en tot el procés, des de l'obtenció del sensor fins a la seva pròpia simulació microfluídica, així com redissenyar el mecanisme d'accionament per fer-lo més eficaç, a part dels càlculs que s'hagin de realitzar al llarg de l'estudi.

D'aquesta manera, es tracta d'un estudi que no se centra únicament en la part teòrica i de càlculs, com sovint passa a les lliçons de grau, sinó que té un caràcter més experimental i autònom, permetent a l'alumne participar al llarg de tot el procés experimental.

## 1. Introducció

La microfluídica permet la miniaturització de molts processos per a l'obtenció de resultats propers al punt on es necessiten, ja siguin pacients (diagnòstic mèdic), per al sector agroalimentari (control de processos productius per a l'alimentació) o altres. El principal avantatge és la miniaturització, ja que permet minimitzar l'ús de reactius, tot i que per a tal efecte calen microbombes, les quals ens permeten controlar les variables de cabal, pressió, velocitat...

La microfluídica convencional ha aprofitat els avantatges dels fluxos laminars que es generen a escala microfluídica per al desenvolupament de sensors difusius que, entre d'altres, s'apliquen per a l'obtenció del pH, així com per l'obtenció del gradient de concentració per diverses substàncies pel sector industrial, alimentari o de la salut. Tanmateix, la microfluídica convencional requereix processos de fabricació complexes que encareixen el preu, limitant les seves aplicacions.

L'aparició de la microfluídica en paper, aplicada per primer cop per *Whitesides Group* (Martinez et al., 2007), és una eina cada cop més utilitzada, ja que permet disminuir costos a través de mètodes de fabricació més senzills, sovint impressores de cera i/o el tall per làser, entre d'altres. Es tracta d'un producte econòmic i de fàcil obtenció amb el qual es poden obtenir resultats rellevants en diversos àmbits de l'enginyeria i la bio-medicina.

Per al present estudi, s'aprofita el bon comportament del paper davant el fenomen microfluídic, així com una bona capil·laritat i biocompatibilitat, per l'anàlisi del pH de diverses substàncies basant-se en un *set-up* tipus *Point of Care*, utilitzant quantitats de fluids molt menors respecte dels mètodes de mesura de pH convencionals anteriors, permetent la reproducció de l'estudi a un gran nombre de països, realitzant d'aquesta manera un esforç econòmic mínim en comparació a la metodologia esmentada anteriorment.

Tot i tenir com a intenció principal de l'estudi la detecció verídica del pH de diferents substàncies, es tracta d'un *set-up* utilitzable en altres àmbits de la salut, com ara la detecció de malalties patològiques com la tuberculosi, i en anàlisi d'orina, fent-lo aplicable en altres aspectes de major complexitat analítica.

Així doncs, en el present estudi es realitza una tasca de disseny de la morfologia d'un sensor de paper i la del mecanisme de sincronització del propi sensor, que permeti l'estudi de la difusió a nivell microfluídic en una zona convergent on es produeix la difusió entre els analits, permetent realitzar un posterior postprocessat de les dades obtingudes i verificar-les per mitjà de la comparació directa amb el calibratge previ. Aquesta configuració permet la creació d'una instrumentació portable, substituint dispositius de bombeig més sofisticats i complexos en quant al seu funcionament, tenint com a objectiu a llarg termini la seva aplicació en l'àmbit industrial.

## 2. Objectiu de l'estudi

L'objectiu principal de l'estudi és l'obtenció d'un sensor de pH que permeti detectar de manera fiable i repetitiva el pH de diversos fluids. Aquest sensor ha de treballar amb un volum finit de reactiu. Per tal d'optimitzar la seva sensibilitat es realitza un estudi previ de la seva morfologia per tal d'adaptar-se al mecanisme utilitzat, realitzant el procés de prototipatge per mitjà del *software* Ansys. Un cop validat, s'utilitzarà el model per determinar la millor geometria del substrat porós del sensor.

Posteriorment, el model de simulació es validarà comparant-lo amb els resultats experimentals, els quals s'analitzaran mitjançant el programari *ImageJ* conjuntament amb *Microsoft Excel*.

A més, es buscaran adoptar millores al llarg del procés experimental, des del disseny de nous sensors de pH, fins a la corresponent prova microfluídica d'aquest, convertint-lo en un procés estandarditzat, aplicant sempre la mateixa metodologia.

També es consideraran en tot moment possibles millores del mecanisme que permet el moviment vertical del substrat del sensor de pH per tal d'assegurar la perfecta sincronització en la dispensació dels reactius, realitzant una profunda tasca de disseny, tot considerant els nous dissenys de sensor, element condicionant dels experiments.

Per últim, també formaran part dels objectius del present estudi realitzar una síntesi de les conclusions que s'obtinguin a partir de l'anàlisi dels diferents sensors dissenyats al llarg del treball, marcant una línia a seguir per a futurs estudis d'aquest àmbit.

### 2.1 Abast de l'estudi

Aquest estudi engloba:

#### Disseny dels sensors de pH amb *SolidWorks*

A través del programari *SolidWorks* es realitzaran els diferents dissenys dels sensors de paper. Des de *SolidWorks* s'exportaran els croquis a Ansys per la realització de les simulacions i a RDWorks V8 per comunicar-li el patró de tall a les màquines làser utilitzades.

#### Tallat dels sensors de pH

Mitjançant la màquina de tall làser del FabLab Terrassa, així com la màquina personal del professor López Martínez, es realitzarà la fabricació dels sensors. Utilitzant el *software* associat RDWorks V8 es transmetran els arxius d'extensió *.dxf* a la màquina làser per a l'obtenció dels substrats dels sensors.

### Disseny del mecanisme de sincronització per als experiments de fluid

A l'inici de l'estudi, es detecta com la subjecció del sensor per part del mecanisme de sincronització provoca tremolors i inestabilitat durant el moviment vertical del substrat del sensor, tractar-se d'un sistema amb poca repetibilitat (problema inicial de l'estudi). Es realitzarà una profunda tasca de disseny del mecanisme manual de sincronització per tal de reduir al màxim els tremolors i altres inconvenients intrínsecs al mecanisme actual.

El disseny es durà a terme mitjançant el programari *SolidWorks*, igual que amb els sensors de pH.

### Determinació del protocol òptim de testeig

S'idearà una metodologia de treball òptima, on es detallaran els diferents passos a seguir fins a arribar al testeig dels sensors i el corresponent tractat de dades, estandarditzant el procés per tal de possibilitar la comparació directa entre resultats.

### Prototipatge dels sensors per mitjà de simulacions amb *Ansys Fluent*

La metodologia de treball emprada tractarà d'evitar el *try & error* per mitjà de les simulacions amb *Ansys Fluent*, permetent analitzar el comportament dels diferents dissenys de sensors prèviament a la seva fabricació.

Les simulacions es realitzaran per mitjà del *workbench Fluid Flow Fluent* (FFF), el qual es basa en les equacions de moment i conservació de la massa (Navier-Stokes) per la resolució del codi CFD (*Computational Fluid Dynamics*), així com la llei de difusió de Fick.

### Testeig dels diferents sensors de paper i mecanismes

S'analitzarà el funcionament de diferents versions de sensor i mecanismes per avaluar-ne la seva funcionalitat utilitzant aigua amb colorant. Un cop determinat quin disseny de sensor és més efectiu, aquest s'utilitzarà per analitzar diferents marcadors i solucions de pH per tal d'avaluar-ne la seva repetibilitat amb diferents fluids.<sup>1</sup>

### Postprocessat de les dades amb ImageJ

Els experiments es gravaran amb el microscopi *DinoLite* per poder analitzar la difusió entre reactius a la zona central del sensor de paper. Les captures s'analitzaran a través del perfil RGB d'*ImageJ*.

---

<sup>1</sup> Amb motiu de la pandèmia de la COVID-19, no s'ha pogut accedir al laboratori per la realització de les proves experimentals amb altres marcadors i substàncies de pH diferent. S'ha aprofundit al màxim en els resultats de les proves experimentals que s'han pogut realitzar amb colorant alimentari, així com s'ha determinat el model de simulació òptim, per en un futur disposar d'aquest a l'hora de simular amb altres fluids.



### Comparativa dels resultats: Simulacions (Ansys) vs Experimentació (ImageJ)

Per tal de corroborar els resultats obtinguts i verificar el model de simulació, es compararan els resultats obtinguts a partir de les simulacions i els de les proves realitzades al laboratori, permetent la detecció de possibles diferències, així com l'anàlisi de les mateixes per determinar-ne el seu origen.

## 2.2 Planificació de l'estudi. Diagrama de Gantt

PLANNING PROJECTE TREBALL FI D'ESTUDIS (Curs 2019 - 2020) - Pau Fernández Faya																							
		SETMANES 2020																					
Activitat	Descripció	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27
Matrícula del TFE i presa de contacte	Es tindrà la primera reunió amb el professorat, detectant els primers punts conflictius del projecte																						
Anàlisi dels punts conflictius (teoria vs realitat)	Resum dels punts a considerar i dissenys amb SolidWorks																						
Tallat làser dels sensors	Els sensors es tallen amb màquina làser del FabLab Terrassa i el software RDWorks V8																						
Experimentació amb els sensors i el mecanisme	S'utilitzaran els sensors tallats a les setmanes anteriors amb el mecanisme que s'estigui usant																						
Simulacions amb Ansys (Fluid Flow Fluent)	S'aplica Navier-Stokes per obtenir resultats fiables																						
Disseny d'una possible nova versió del mecanisme	Es tindràn en compte els punts negatius recopilats fins a la data																						
Redactat de memòria	Redactat del document per al compliment de les entregues intermitjes i final																						
Obtenció dels dissenys "definitius" de sensor/s i mecanisme d'accionament	Per aquestes dates s'hauràn de tindre els dissenys finals decidits																						
Post-processat de dades dels experiments amb sensors	S'usa ImageJ per extreure conclusions de les capures amb microscopi DinoLite																						
Comparació de les simulacions amb els resultats experimentals	S'haurà de determinar si existeix relació amb les simulacions i els resultats obtinguts																						
Redactat de les conclusions finals	S'hauran d'extreure unes conclusions clares a partir de la realització de tot l'estudi																						

Taula 1: Diagrama de Gantt de l'estudi – Font: Autor

Cal destacar que es tracta d'una aproximació del *planning* de l'estudi, podent aquest patir modificacions a causa d'altres variables de l'estudi que en el seu inici no són controlables, com per exemple ho ha estat l'estat d'alarma generat per la pandèmia de la COVID-19.

### 3. Estat de l'art

#### 3.1 Ús del paper en estudis microfluídics per l'anàlisi de pH. Estudis previs.

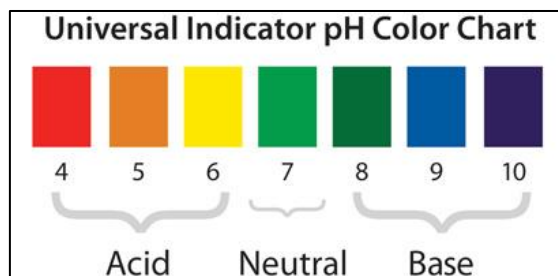
Cada cop més s'està utilitzant paper normalitzat en estudis de caràcter científic, a causa del seu bon funcionament en el si del fenomen microfluídic i, sobretot, degut al seu baix cost en comparació als mètodes més tradicionals, generalment formats per sistemes de microbombeig.

A mode de resum, s'adjunta la següent taula on es destaquen els principals punts a favor i en contra de l'ús del paper en estudis de recerca:

AVANTATGES	INCONVENIENTS
Repetibilitat de l'experiment amb fluids de pH diferents	Sensor delicat, dificultant el posicionat del dispositiu
Abaratiment de costos en comparació a la resta de "tècniques" de mesura que incorporen un sistema de conducció de fluid per mitjà de micro-bombes	Possibilitat de contaminació del paper, amb la corresponent obtenció de lectures errònies de pH
Possibilitat d'usar-se en altres situacions, com ara anàlisis de sang, detecció d'infeccions...	Sistema de mesurament del pH sense automatització. Díficil d'aplicar per l'experimentació simultània amb diversos sensors
Possibilita el desenvolupament amb diagnòstics "POC – Point of Care" amb un equip bàsic de treball	
Anàlisi visual "immediat" a través de la colorimetria adaptada pel sensor. Obtenció de resultats aproximats en temps mínim.	
Possibilitat de mesurar el pH d'un cert producte sense haver-nos de distanciar del mateix (proves <i>in-situ</i> ).	
A causa de les seves dimensions reduïdes i a la porositat que presenta el substrat de paper, es minimitza en gran mesura la quantitat de reactiu a utilitzar, els quals acostumen a tenir un preu elevat.	

Taula 2: Avantatges i inconvenients del paper normalitzat en estudis micro-fluídics – Font: Autor

Actualment existeixen dispositius electrònics per a la detecció del pH de les substàncies. Aquests dispositius transformen una senyal analògica, la qual la dona una matriu de vidre que actua com a sensor, en un valor de pH, el qual es visualitza a través d'una pantalla. Hi han altres sistemes per mitjà de transistors tipus P, però necessiten un muntatge més complex per al mesurament del pH (Bouhadda et al., 2014).



Il·lustració 1: Diagrama bàsic de la distinció del pH d'una substància en funció del color adoptat – Font: <https://www.pinterest.es/pin/55098795429208019/>

La colorimetria adoptada per les reaccions químiques produïdes en un anàlisi de pH estableix el rang de pH en el que es troba la substància analitzada, tractant-se d'un mètode qualitatiu d'anàlisi. En funció de la concentració d'acidesa d'una substància, aquesta adoptarà conjuntament amb el reactiu un color o un altre, tal com es mostra a la il·lustració 1 anterior.

Els sensors de paper mostren aplicabilitat en diversos camps de la ciència i la bio-medicina, però com a primer estudi per la comprovació del seu correcte funcionament, s'ha decidit centrar l'estudi en la detecció del pH.

Es té constància dels bons resultats que ha donat el paper normalitzat en aquesta tipologia d'estudis, en particular en la mesura de la difusivitat de l'ió  $H^+$ , la qual es dona en un temps molt curt de temps per sistemes microfluídics. El paper normalitzat sembla ser doncs, un nou dispositiu de mesura a tindre en compte a partir d'ara en el camp de la recerca. (Osborn et al., 2011) afirmen en el seu estudi els bons resultats que mostren els dispositius formats a partir de material cel·lulòsic davant de fenòmens microfluídics, tot i que en el seu estudi no es limita la quantitat de reactiu, el qual pot esdevenir en un inconvenient en cas d'emprar reactius de preu elevat.

S'han realitzat altres estudis on es busca determinar una aproximació matemàtica per mitjà d'un model que permeti predir el gradient de concentració i diversos paràmetres de la difusió dels fluids: velocitat de flux, caiguda de pressió, amplada de difusió generada (Jang et al., 2018). En els casos anteriors, la principal limitació és aconseguir la sincronització de la dispensació de les mostres quan aquestes tenen un volum finit, mateix inconvenient que presenta el nostre sistema inicialment.

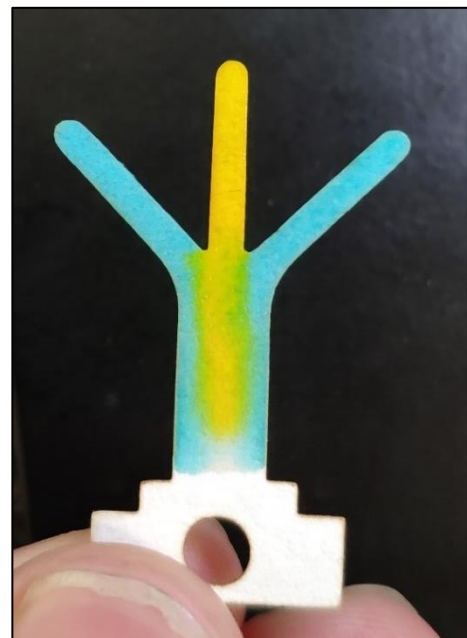
### 3.2 Funcionament del sensor de paper. Mesurament del pH i amplada de difusió.

El present estudi té com a objectiu desenvolupar un sistema de testeig tipus *POC*, amb la intenció de què l'experiment sigui portable i reproduïble en qualsevol entorn, corroborant el bon funcionament dels sensors de paper. A més, es tracta d'una metodologia de testeig que permet minimitzar les quantitats de reactiu a utilitzar en comparació als seus antecessors de microfluídica en paper.

El paper es beneficia del seu bon comportament davant el fenomen de difusió, el qual es regeix per la **Llei de difusió de Fick** a causa de la laminaritat que presenta el moviment del flux a través de la superfície del substrat. Es tracta d'un sistema de treball *user-friendly*, gràcies a la poca complexitat que té la realització de l'assaig en qüestió. A continuació es presenta la llei de difusió de Fick:

$$J = -D * \frac{\partial \phi}{\partial x}$$

Equació 1: Llei de difusió de Fick



Il·lustració 2: Sensor v7 amb conductes laterals inclinats 45° respecte el central després de realitzar una prova de fluid amb aigua i colorant alimentari. Sincronització òptima – Font: Autor

essent:

$J$ : Flux difusiu, el qual defineix la quantitat de substància per unitat d'àrea i temps  
 $\left[\frac{\text{mol}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}}\right]$

$D$ : Coeficient de difusivitat (relatiu a la substància que s'estigui estudiant)  $\left[\frac{\text{m}^2}{\text{s}}\right]$

$\phi$ : Concentració de substància per unitat de volum (es considera mescla ideal)  $\left[\frac{\text{mol}}{\text{m}^3}\right]$

$x$ : Posició on es produeix la difusió per l'eix X [m]

S'aprofundeix en major mesura sobre la llei de difusió de Fick i el seu càlcul dins el codi CFD del *software Ansys Fluent* a l'apartat 7.1 del present document.

La llei de difusió de Fick s'utilitza en sistemes on hi ha presents gradients de concentració d'una substància, produint-se el flux de partícules per tal d'homogeneïtzar la concentració per tot l'espai útil de difusió, com és el cas de la difusió dels reactius a través dels extrems dels conductes d'entrada del sensor de paper, superfície a través del qual es produeix la propagació dels reactius (equilibri químic). Si la substància d'estudi té més concentració, aquest gradient serà més gran en un interval de temps menor.

Per tant, si es fixa el punt de mesura de la longitud de difusió, el sensor de paper, el qual es pot definir com un sistema **2DPN** (*Two Dimensional Porous Network*), permet mesurar l'acidesa de diferents substàncies a partir de la difusió dels ions d'hidrogen  $\text{H}^+$  en aquest punt.

La longitud de difusió guarda relació directa amb la concentració acídica ó *ionic strenght*. A més, el gruix de difusió depèn de la concentració dels ions d'hidrogen  $\text{H}^+$ , els quals reaccionen químicament amb el colorant a la zona central del substrat on convergeixen els 3 analits, produint-se la difusió entre substàncies. El gruix de difusió guarda relació directa amb la Llei de Difusió de Fick, explicada en apartats posteriors.

El mesurament del pH de les substàncies es realitza a través de l'anàlisi dels colors adoptats i les seves intensitats a través del perfil RGB (*red-green-blue*) d'*ImageJ*, aprofitant-nos de la difusió dels ions amb el colorant a la zona de difusió central del dispositiu.

Dit anàlisi és possible gràcies a l'ús del microscopi *DinoLite Edge Digital Microscope AM4515ZT*, mencionat a l'apartat 4.1.9, el qual permet la gravació dels experiments, a partir dels quals podem extreure imatges de la zona de difusió entre analits i analitzar-ne els colors adoptats pels líquids.

Per altra banda, el sensor permet comprovar l'amplada de difusió generada a la zona central del substrat a causa de la mescla entre els 3 analits, fet que es posa de manifest a la il·lustració 2, al entrar en contacte les substàncies dels conductes laterals amb el colorant, que circula per l'*inlet* central, permetent incorporar una 3ª substància de calibratge en un dels *inlets* i obtenir un punt de referència en el mateix sensor.

Així doncs, existeix una relació proporcional entre concentració de  $\text{H}^+$  i gruix de difusió (Mehdrel et al., 2020), la qual també es pot analitzar posteriorment per mitjà del programari *ImageJ*.

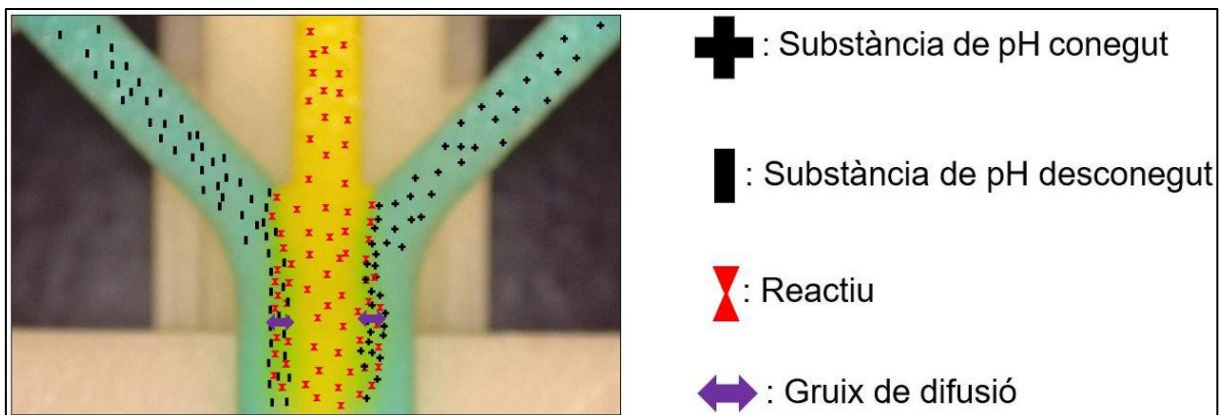
D'aquesta manera, el sensor permet una lectura acurada del pH de la substància, a partir del color i intensitat adoptat per aquesta, així com el gruix de difusió generat a la zona central del substrat vers el colorant central.

Finalment, pel que fa a la metodologia de l'experiment en si, es tracta d'un procediment senzill i ràpid de realitzar, essent una metodologia *user-friendly* en la que no és requerida elevada experiència dels tècnics per dur a terme l'assaig.

Per un dels *inlets* laterals es difon una substància líquida de pH conegut, mentre que per l'*inlet* del costat oposat es difon una substància de pH "desconegut" (en els experiments es coneix el pH de la substància per poder corroborar el correcte funcionament del sensor).

Per l'*inlet* central es difon un colorant (generalment s'utilitza Bromocresol lila 0,04%), encarregat de reaccionar químicament amb les altres dues substàncies a la zona central del substrat, adoptant cadascuna d'elles un cert color i intensitat, així com un cert gruix de difusió respecte del líquid central. (s'ha acabat utilitzant colorant alimentari com a marcador, ja que amb motiu de la pandèmia de la COVID-19 s'han hagut d'aturar les proves experimentals al laboratori).

Per tal de fer més entenedor el funcionament del sensor pel que fa a la difusió, es presenta a continuació la següent imatge, on es representa la difusió dels diferents líquids a través dels conductes del sensor de paper, així com la difusió entre reactius a la zona central del sensor:



*Il·lustració 3: El fenomen de difusió s'il·lustra gràficament a la imatge, on la substància de pH desconegut i la de pH conegut circulen a través del conducte esquerre i dret respectivament. Pel conducte central circula el reactiu (colorant), amb el qual s'aconsegueix el gruix de difusió desitjat – Font: Autor*

### 3.3 Ús de màquina làser per l'obtenció dels sensors de pH

En l'actualitat, el làser s'utilitza en un elevat nombre d'activitats, siguin a la vida quotidiana o en l'entorn professional. A mode de llistat, es destaquen les següents aplicacions del tallat per làser:

- Telecomunicacions: aplicat sobretot per fibra òptica
- Medicina: operacions sense sang, ajuda a la cicatrització, operacions de vista, tractaments quirúrgics, operacions odontològiques...(tallat de sensors de pH per al present estudi)
- Indústria: tallat de xapa metàl·lica, guiat de màquines (sobretot CNC), mesurament de distàncies...



- Defensa: guiat de míssils balístics, radars...
- Enginyeria civil: diferents aplicacions topogràfiques, guiat de màquines per construcció de túnels...

Tanmateix, està present en altres camps com ara: l'arquitectura, investigació científica, desenvolupament de productes comercials (impressores làser, CD's...).

En la següent taula es destaquen els principals avantatges i inconvenients de l'ús de maquinària làser per operacions de tallat:

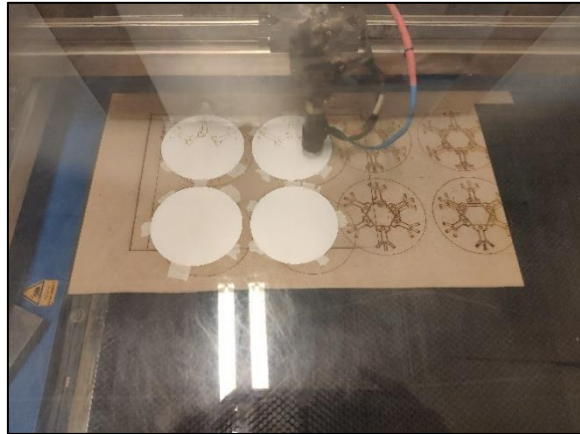
AVANTATGES	INCONVENIENTS
Possibilitat de tallar contorns complicats en diferents tipus de material amb elevada precisió	Inversió relativament alta en maquinària (ús professional)
No es necessiten matrius de tall ni motlles per fer un bon ajust de siluetes	Tall no tan precís en materials conductors. Possibilitat de tindre rebava
Combinació molt profitosa amb el CNC. Reducció del temps de producció i increment de l'efectivitat	Materials o peces reflectives a evitar
Accionament robòtic (distància entre capçal i material constant)	S'ha de vigilar amb les potències de tall, sobretot al tallar fusta o paper, ja que es pot cremar el material ( <b>crític per als sensors de pH</b> )
Es poden realitzar talls amb velocitats elevades ( $V_{\text{màx}} \approx 6 \text{ m / min}$ )	Peces amb diferent espessor de material no són la millor opció (les velocitats es veuen afectades)
Absència d'utilitatges per a la subjecció del material a tallar (no hi ha fricció amb el material)	És necessari treballar en ambients ventilats / tindre sistemes de ventilació i extracció de gasos per tal d'evitar la respiració del material desintegrat pel làser
Contaminació pràcticament nul·la	
No és necessari l'ús de cap eina de tall (fulla, serres...)	
Residus escassos sense inferir en la trajectòria	
Possibilitat de realitzar talls de profunditat < 1mm	
Tècnica perfecta per realitzar talls previs	

Taula 3: Avantatges i inconvenients de l'ús de màquina de tall làser per l'obtenció dels sensors de pH – Font: Autor



Es tracta doncs d'una tècnica amb una gran aplicabilitat, la qual l'hem aprofitat per realitzar el tallat dels sensors de paper, tal com es mostra a la il·lustració 4. Simplement s'ha necessitat obtenir un arxiu *.dxf* (superfície) a partir de *SolidWorks* per poder exportar l'arxiu de tall.

Les màquines làser són màquines tipus CNC, les quals operen per mitjà d'un *software* a través dels quals podem treballar amb els nostres arxius d'origen, en el nostre cas, arxius tipus CAD, per la parametrització de les diferents variables de tall de què disposi el programa associat.



*Il·lustració 4: Tallat làser del paper normalitzat Whatman N° 05 amb la màquina BCN3D Ignis del FabLab Terrassa – Font: Autor*

Per tant, es tracta d'un tipus de màquines que permeten el tallat de diversos materials, les quals utilitzen *softwares* que acostumen a ser intuïtius, sense necessitat de tindre gran experiència prèvia en el tall per làser.

Així doncs, s'ha cregut convenient obtenir els sensors de paper a través d'aquesta tècnica, tractant-se d'un procés net, amb residus i contaminació mínima, amb un cost de producció relativament baix (servei FabLab Terrassa) i una gran adaptabilitat a l'hora de realitzar el tallat de diferents geometries de sensor de forma simultània.

## 4. Instrumentació per la realització dels experiments

### 4.1 Equip necessari

#### 4.1.1 Paper normalitzat Whatman (GE Healthcare Life Sciences)

Es tracta d'un paper de filtre normalitzat qualitatiu de la marca comercial de *GE Healthcare Life Sciences, Whatman*, ideal per a les nostres necessitats d'assaig a causa del seu caràcter porós.

És el material del qual estan fets els sensors de pH que s'utilitzen en el present estudi. Tot i que hi ha de diversos tipus, l'usat al laboratori és el CAT N° 05 No. 1005-110, mostrat a la il·lustració 5.



*Il·lustració 5: Caixa d'emmagatzematge del paper normalitzat Whatman N° 05, junt amb un cercle de paper Whatman N°05 de diàmetre 110 mm usat per l'obtenció dels sensors - Font: Autor*

El valor de gruix del paper per la realització dels càlculs pertinents ha estat de  $t = 186 \cdot 10^{-6}m$ , valor que s'ha consultat a l'estudi de (Casals-Terré et al., 2020), en el qual es mesura el gruix del paper amb precisió.

#### 4.1.2 Pinces de subjecció

Per tal de poder subjectar i emmagatzemar els sensors de pH s'han usat unes pinces de subjecció, les quals ajuden a evitar la contaminació dels sensors i d'aquesta manera obtenir lectures de pH amb més precisió.



*Il·lustració 6: Pinces de subjecció utilitzades en el posicionat dels sensors de paper al mecanisme d'accionament – Font: Autor*

Les pinces utilitzades per la correcta col·locació dels sensors de paper es mostren a la il·lustració 6.

A més, ens serveixen per poder subjectar els sensors de paper sense malmetre'ls, subjectant-los des de la seva base, la qual no té cap funcionalitat pel que fa a la difusió dels reactius.

Les pinces es renten amb dissolvent de base alcohòlica un cop s'han finalitzat els experiments, per tal que estiguin disponibles per al seu ús en les pròximes proves a realitzar.

#### 4.1.3 Ordinador portàtil

El PC ha estat una eina bàsica durant la realització de l'estudi. Sense deixar-lo de banda, es destaquen les tasques més importants realitzades amb el PC:

- Disseny de nous sensors de pH (croquis 2D) amb *SolidWorks*
- Disseny de nous mecanismes de sincronització amb *SolidWorks*
- Configuració de velocitats i potències de tall amb *RDWorks V8*
- Visualització en temps real i captura d'imatges de les proves experimentals amb el microscopi *DinoLite*
- Simulacions de fluid amb el programari *ANSYS Fluid Flow Fluent (FFF)*

- Postprocessat dels experiments per mitjà d'*ImageJ* i posteriorment amb *Excel*.
- Redacció de la documentació a entregar pel present estudi

#### 4.1.4 Màquina de tall làser CNC *BCN3D Ignis* (FabLab Terrassa)

La **BCN3D Ignis** és la màquina de tall làser de CO<sub>2</sub> amb la qual s'han realitzat els talls dels sensors de pH al Fablab de l'ESEIAAT, la qual es mostra a la il·lustració 7.

Es tracta d'una màquina de tipus "*Plotter*" d'elevada potència (100 W) amb la qual es poden realitzar talls en diferents tipus de materials: plàstic, fusta, cuir, fibra i en el nostre cas, paper. A més, també ens permet dur a terme operacions de marcat i gravat.



Il·lustració 7: Màquina BCN3D Ignis del FabLab Terrassa – Font: Autor

Es tracta d'una màquina ideada per al tall i gravat de materials de més gruix i complexitat de mecanitzat que el paper normalitzat, com ara metacrilat i fusta, pel que en el present estudi s'ha hagut d'ajustar

amb precisió la potència requerida per al tall del paper (en cas contrari es crema el material i el sensor esdevé inservible). A més, al tractar-se d'un dispositiu de reduïdes dimensions, s'han detectat imperfeccions i tremolors en el tallat del sensor, ja que la màquina se cenneix al *set point* de velocitat donat per l'usuari.

Tot i ser una màquina làser de qualitat, no està pensada per al tallat de paper ja que dona una potència i velocitats de tall superiors a les requerides per al nostre estudi, així com no ha estat dissenyada pel tallat de peces de tan reduïdes dimensions.

A partir del programari CNC associat *RDWorks V8*, es programen els paràmetres de potència i velocitats de tall, així com els *offsets* de posició a definir a l'hora de posicionar el capçal làser allà on convingui per al nostre tall.

#### 4.1.5 Màquina de tall làser d'ús domèstic: **NEJE 7000mW**

Màquina utilitzada per evitar la cremada dels sensors de paper a causa de l'elevada potència de la màquina làser del FabLab Terrassa. La màquina en qüestió és la *NEJE 7000 mW*, la qual ha permès continuar amb les proves experimentals tot i l'estat d'alarma generat per la pandèmia de la COVID-19.

Es tracta d'una màquina adient per treballs de caràcter quotidià, que requereixen menors potències, obtenint inclús millors resultats en el tallat dels sensors, tot i tardar més temps en el procés.

A més, al tractar-se d'una màquina amb capacitats de tall inferiors, s'aconsegueix major qualitat en el traçat del patró de tall, sense tremolors degut a les velocitats inferiors amb les quals pot treballar la màquina.

#### 4.1.6 Màquina d'impressió 3D d'ús domèstic: **ZORTRAX M200**

La màquina emprada ha estat la *ZORTRAX M200*, la qual ens ha permès fabricar els diferents dissenys del mecanisme de sincronització, així com provar amb diferents variants d'una mateixa peça per tal de comprovar-ne el seu comportament vers els canvis geomètrics i de dimensió.

La màquina permet fabricar un mecanisme de sincronització complet en un temps aproximat de 8 hores, pel que es tracta d'una màquina suficientment ràpida per les necessitats requerides en el present projecte. D'aquesta manera, tots aquells inconvenients trobats als mecanismes durant la realització de les proves al laboratori es poden resoldre per la següent setmana i d'aquesta manera resoldre de manera continuada els inconvenients trobats.

A més, ha servit per continuar amb la tasca de disseny del mecanisme tot i la impossibilitat d'accedir a l'escola amb motiu de la pandèmia de la COVID-19.

#### 4.1.7 Micropipetes de dosi controlada

Per dipositar els reactius als contenidors a l'hora de realitzar l'experiment microfluídic és necessari controlar la quantitat de fluid que s'aboca, per tal d'assegurar que en cada contenidor hi ha la mateixa quantitat de fluid i que per tant l'absorció dels reactius a cadascun dels tres conductes d'entrada del sensor és la mateixa.

Per aquest motiu s'han utilitzat unes micropipetes de precisió, amb les que es pot administrar la quantitat de líquid exacte que es desitgi. S'ha intentat minimitzar al màxim el consum de reactius, fixant-se la quantitat en 60  $\mu$ l per cada contenidor del dipòsit.

Per tal d'evitar contaminació entre fluids, s'usen puntes per les pipetes d'un sol ús, evitant la barreja de fluids. Es mostra a la il·lustració 8 les puntes emprades.



*Il·lustració 8: Protector per les puntes de les micropipetes usades a les proves experimentals – Font: Autor*

#### 4.1.8 Fluids de pH conegut i colorant

Per la realització dels experiments són necessaris 3 fluids: una substància de pH conegut, un marcador de pH i finalment una substància de pH “desconegut”.

El colorant usat ha estat, generalment, Bromocresol lila 0,04 %, tot i que s'han utilitzat diferents colorants per tal d'avaluar la repetibilitat dels sensors de paper, objectiu de l'estudi. A més, també s'han utilitzat diverses substàncies, amb molaritats i pH diferents per comprovar la repetibilitat dels dispositius de mesura (amb motiu de la pandèmia de la COVID-19, s'aprofundeix en les proves realitzades amb colorant alimentari i aigua ja que no s'ha pogut accedir a l'ESEIAAT per la realització de noves proves).

Tanmateix, cal destacar que com a fluid de pH “desconegut”, s'usen substàncies de les quals se sap el pH, per tal de poder comparar el color, intensitat i gruix de difusió en referència a la substància de la qual se'n coneix el pH. D'aquesta manera, s'aconsegueix trobar un patró pH – intensitat de color per a futurs experiments, així com establir una tendència de la relació pH – amplada de difusió.

Destacar que a les proves inicials s'usa aigua mesclada amb colorant blau, com es mostra a la il·lustració 9, així com diferents colorants alimentaris, ja que inicialment es vol observar com es comporten els primers dissenys de sensor respecte la sincronització dels 3 *inlets*, primer inconvenient en la realització dels experiments.

#### 4.1.9 Microscopi *DinoLite*

Es tracta d'un microscopi òptic amb el qual es treballa connectat a l'ordinador via USB, tenint visual de l'objectiu de la lent directament a la pantalla del PC.

Amb el dispositiu *DinoLite*, mostrat a la il·lustració 10, es realitza la gravació dels diferents experiments realitzats, podent-se mesurar amb exactitud la velocitat del front de flux, així com diverses fotografies per tal de poder analitzar posteriorment l'amplada de difusió amb *ImageJ*.

Les fotografies i gravacions es realitzen a través del software associat *DinoCapture*.



*Il·lustració 9: Una de les proves inicials de l'estudi amb aigua i colorant blau com a fluid. Mecanisme 2S\_DEVICE\_H01 – Font: Autor*



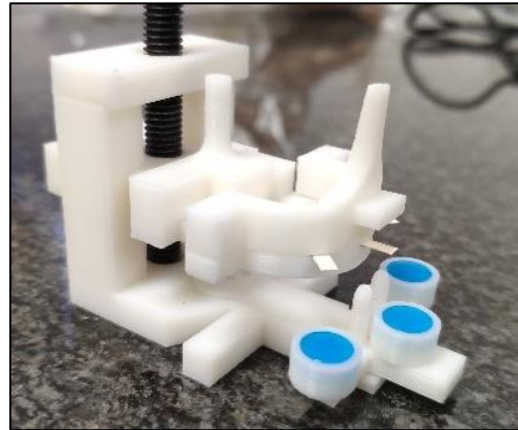
*Il·lustració 10: Microscopi DinoLite utilitzat en els experiments amb els sensors i diferents fluids – Font: Autor*



#### 4.1.10 Mecanisme de sincronització dels reactius

Per dur a terme el contacte entre el sensor i els fluids s'usa un mecanisme d'accionament manual. A la il·lustració 11 es mostra el disseny fabricat 3S\_DEVICE\_H01\_1 en la realització d'una de les proves experimentals, el qual és el 3<sup>er</sup> disseny d'un total de 6 realitzats per tal d'aconseguir el correcte funcionament del dispositiu.

Es tracta d'un conjunt de peces obtingudes a partir d'impressió 3D, les quals possibiliten el moviment vertical d'una peça mòbil, que subjecta el sensor de paper.



*Il·lustració 11: Mecanisme d'accionament 3S\_DEVICE\_H01\_1 en una de les proves inicials de l'estudi – Font: Autor*

El moviment es du a terme pel gir d'un cargol, que acciona el moviment a través d'un forat roscat. La peça que conté el sensor és guiada fins al límit inferior, arribant als contenidors on s'aboquen els reactius, produint-se l'absorció dels reactius. L'ascens posterior es du a terme de la mateixa manera, girant el cargol en sentit contrari.

Al llarg de l'estudi s'ha realitzat una profunda tasca de disseny, generant diferents versions del mecanisme fins a obtenir una sincronització òptima en el contacte dels reactius amb la superfície del sensor.

#### 4.1.11 Planxa dels sensors

Els cercles de paper Whatman que s'utilitzen com a substrat del sensor tenen una deformació inicial que genera una curvatura en els sensors de paper difícil de contrarestar, la qual dificulta la sincronització de la dispensació dels reactius.

Per aquest motiu usem una petita planxa per aplanar al màxim els sensors de pH.

Tanmateix, a mitjans de l'estudi es va començar a usar una planxa especialitzada en el planxat de paper, mostrada a la il·lustració 12, la qual planxa en fred, afectant el mínim a les característiques físiques del substrat de paper.

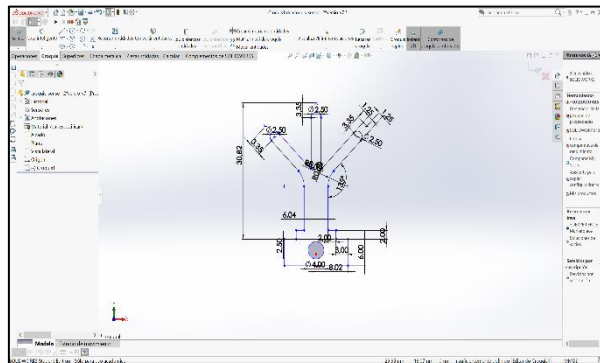


*Il·lustració 12: Planxes especialitzades en el planxat de paper (planxat en fred) utilitzades prèviament a la realització de les proves experimentals – Font: López Martínez, Joan Antoni*

## 4.2 Softwares utilitzats

### 4.2.1 SolidWorks

Amb el programari *SolidWorks 2018-2019* s'han realitzat els diferents dissenys dels sensors a partir de croquis 2D, tal com es mostra a la il·lustració 13. A més, el programa ens possibilita la realització de matrius per tal d'aprofitar al màxim el paper normalitzat *Whatman* i tallar diversos sensors a l'hora.

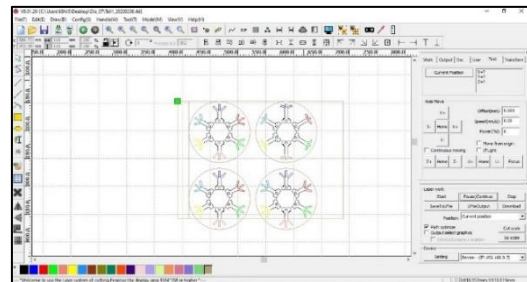


Il·lustració 13: Modelat d'un sensor amb croquis 2D a *SolidWorks* – Font: Autor

A més, el disseny de les noves versions del mecanisme de sincronització s'ha realitzat amb el mateix programari, així com l'assemblatge de les diferents peces per l'obtenció dels dissenys finals de mecanisme.

### 4.2.2 RDWorks V 8.0

Es tracta del *software* associat de la màquina làser del FabLab Terrassa, el qual ens permet configurar les potències i velocitats de tall, així com ajustar la posició d'origen del tall a les coordenades desitjades a partir d'un arxiu *.dxf* generat amb *SolidWorks*. Es mostra a la il·lustració 14 un retall del menú principal del programa durant la programació de les velocitats i potències de tall.



Il·lustració 14: Configuració de les velocitats de tall i dels offsets de posició al *RDWorks V 8.0* – Font: Autor

El programa ha permès realitzar talls amb velocitats diferents i poder comprovar el resultat de tall obtingut, així com s'ha pogut determinar la potència òptima de tall dels sensors de paper sense malmetre'ls.

### 4.2.3 DinoCapture

El microscopi *DinoLite* s'usa amb el programari associat *DinoCapture*, el qual permet realitzar instantànies i vídeos a través d'una lent de gran augment amb elevada qualitat visual, tot a través de l'ordinador.

Gràcies a l'esmentat *software*, es poden guardar imatges dels diferents assajos microfluidics per tal d'analitzar el comportament de la difusió dels reactius en els diferents sensors tallats.



Il·lustració 15: Presa de dimensions d'un sensor v2 amb *DinoCapture* – Font: Autor



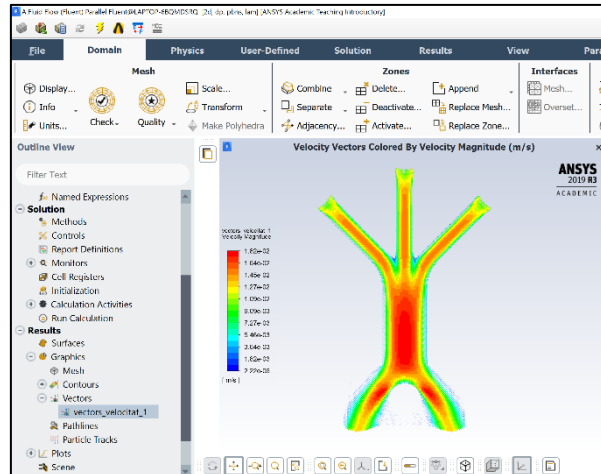
El contingut *media* generat s'usa posteriorment amb *ImageJ* per tal de poder comparar-ho amb els resultats de les simulacions.

A la il·lustració 15 anterior, s'observa un retall del menú d'imatge del *software DinoCapture*, que permet realitzar mesures *in-situ* de l'element que s'està observant, gràcies al qual s'ha pogut mesurar la posició del front de flux a cada instant de les gravacions.

#### 4.2.4 ANSYS Fluid Flow Fluent (FFF)

Amb el programari *Ansyes FFF* s'han pogut realitzar simulacions de fluid amb diversos dissenys de sensors de paper, per tal de tindre prediccions sobre el comportament dels diferents dissenys realitzats i evitar convertir l'estudi en un *try & error* constant.

Es tracta d'un potent programa que es basa en la llei de difusió de Fick i les equacions de Navier-Stokes amb el qual es poden realitzar mallats densos del cos a simular, permetent introduir les diferents variables d'estudi (velocitat, caiguda de pressió, característiques de la zona porosa...) per tal d'aconseguir resultats el més propers a la realitat mitjançant càlculs iteratius. A la il·lustració 16 s'observa un retall del resultat obtingut en una de les simulacions inicials de l'estudi, per un sensor v2 vers la velocitat del front del fluid.

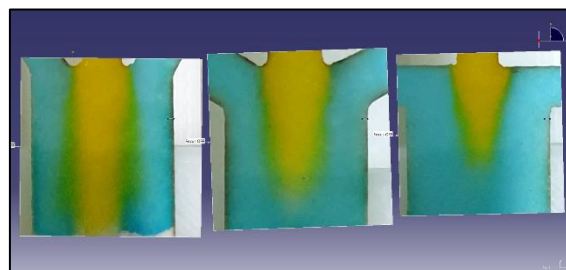


Il·lustració 16: Gràfic de color de la velocitat del fluid (aigua) sobre la superfície del sensor v2. Simulacions inicials amb *Ansyes FFF* – **Font:** Autor

S'ha validat el model de càlcul de les simulacions realitzades a través de la comparativa directa amb els resultats obtinguts a través d'*ImageJ* de les proves experimentals realitzades.

#### 4.2.5 CATIA V5

S'ha utilitzat l'eina de redimensionat (ajust de les escales) amb el *software CATIA V5* per tal de possibilitar l'anàlisi de color RGB a través d'*ImageJ* per imatges múltiples. Al redimensionar les imatges, podem realitzar l'anàlisi simultani de les difusions per diferents sensors en un punt concret de mesura.



Il·lustració 17: Conjunt de 3 imatges reescalades per mitjà del *software CATIA V5* – **Font:** López Martínez, Joan Antoni

Al disposar de diverses imatges redimensionades una al costat de l'altre, es pot analitzar la difusió en un punt de mesura concret per totes 3 imatges a l'hora, tal com es mostra a la il·lustració 17.

## 5. Metodologia de treball

En la realització de les proves experimentals s'ha ideat un protocol de testeig, el qual engloba des del disseny del dispositiu de mesura fins a l'anàlisi dels resultats de les proves al laboratori, el qual s'ha aplicat per cadascun dels sensors fabricats al llarg de l'estudi. D'aquesta manera, s'ha aplicat el mateix mètode per tots els dispositius fabricats per tal d'estandarditzar al màxim el procés a seguir, minimitzant possibles errors de protocol que impedeixin la comparativa directa dels resultats.

En primer lloc es dissenya el dispositiu de mesura per mitjà de *SolidWorks*, el qual s'ha utilitzat per al disseny dels diferents dispositius, per a continuació simular-los per mitjà del programari d'elements finits *Ansys Fluent*, el qual ha estat una eina vital a l'hora de realitzar el prototipatge dels sensors.

*Ansys Fluent* és una eina vital en el protocol a seguir, ja que ens permet predir el comportament dels dispositius davant el fenomen de difusió, evitant convertir el procés en una prova i error constant, minimitzant costos i temps de fabricació dels dispositius.

Havent assegurat el correcte funcionament del dispositiu a través de la seva simulació es procedeix a la seva fabricació per mitjà de tall làser. S'usa la màquina de tall làser del FabLab Terrassa per la realització dels talls, pel que prèviament es prepara una plantilla 2D amb la qual es poden fabricar fins a 24 dispositius de manera simultània. L'arxiu de tall s'importa al *software RDWorks V8.0*, a través del qual podem programar els diferents paràmetres de tall (ordre del tall, velocitat, potència...) i procedir al tallat làser dels dispositius de mesura.

Un cop fabricats, aquests s'emmagatzemen (és important tenir cura degut a la delicadesa dels dispositius) i es planxen en fred, ja que els sensors requereixen planxat en fred per tal d'afectar al mínim les propietats físiques del material (permeabilitat i porositat).

Després del seu planxat, els dispositius es duen al laboratori per la realització de les proves experimentals. Primerament es prepara el mecanisme de sincronització, el qual s'ha de col·locar sobre l'estructura del microscopi DinoLite i observar l'amplada de la captura (ja que les proves experimentals són gravades pel posterior anàlisi). Un cop posicionat, es dipositen 60 µl de cada reactiu als diferents contenidors del dipòsit i després es col·loca per mitjà de l'encaix lateral el dispositiu en el mecanisme.

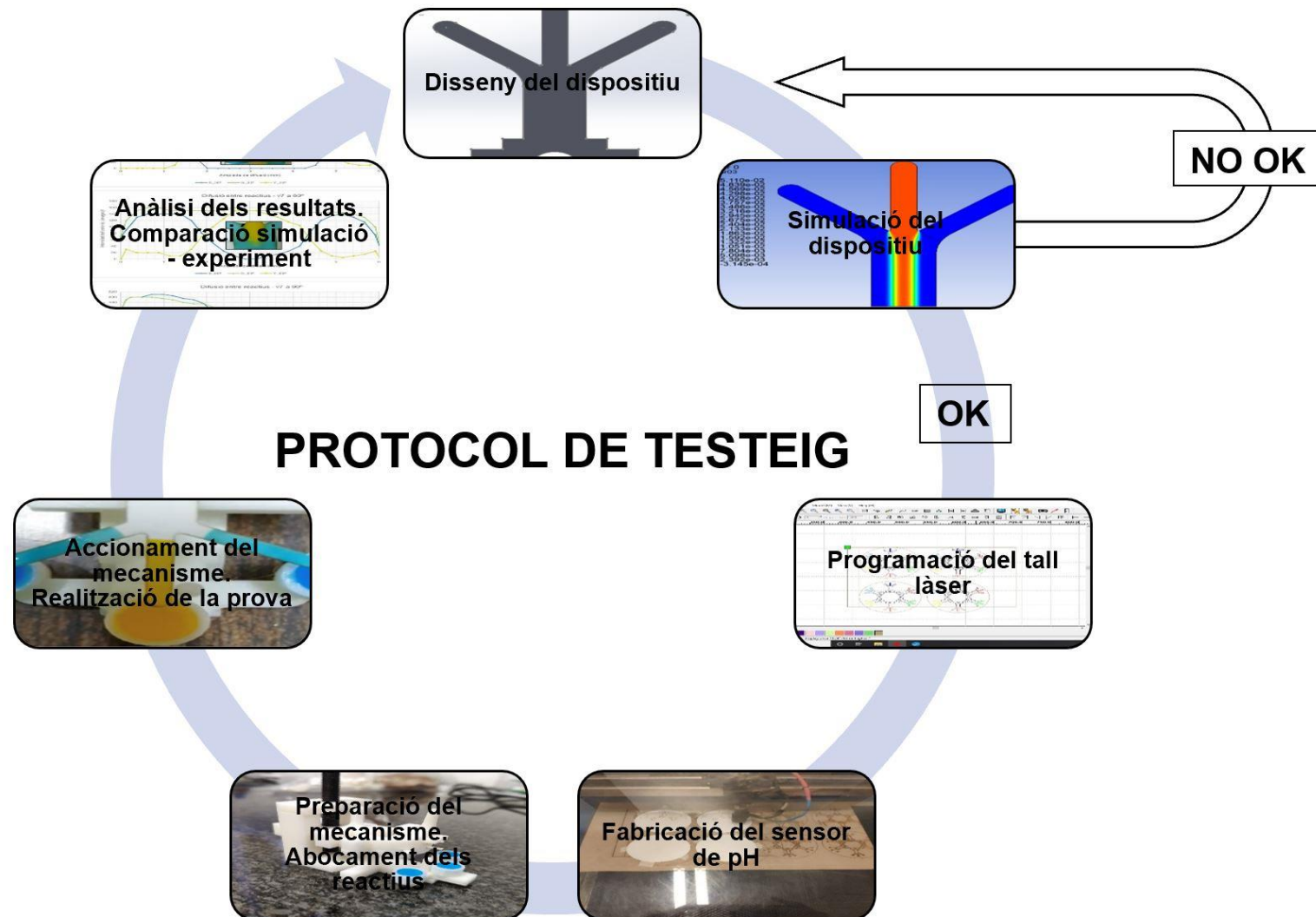
A continuació s'acciona de forma manual el mecanisme de sincronització a través del cargol per tal d'iniciar la prova, el qual transforma el moviment de gir en moviment vertical del substrat. És important accionar el mecanisme suaument per tal de minimitzar al màxim possibles tremolors i d'aquesta manera aconseguir sincronització en el contacte entre substrat i reactiu.

Finalment, a través de la gravació de la prova, s'analitza el comportament del dispositiu pel que fa a la difusió dels reactius a través de les superfícies dels conductes d'entrada (ja que per mitjà de la gravació es pot conèixer la velocitat del front de flux), així com l'amplada de difusió entre reactius produïda a la zona central del dispositiu, analitzada per mitjà del *software ImageJ*.

En cas d'aconseguir resultats òptims a les proves experimentals, aquests es comparen amb els obtinguts a la simulació corresponent per tal de poder validar el model.

Els passos destacats amb anterioritat s'expliquen en profunditat al document **ANNEX I: PROTOCOL DE TESTEIG – GRÀFICS DELS RESULTATS OBTINGUTS**.

A la pàgina següent es mostra un diagrama del protocol seguit en el testeig dels dispositius, el qual explica de manera gràfica el procés seguit de manera general:



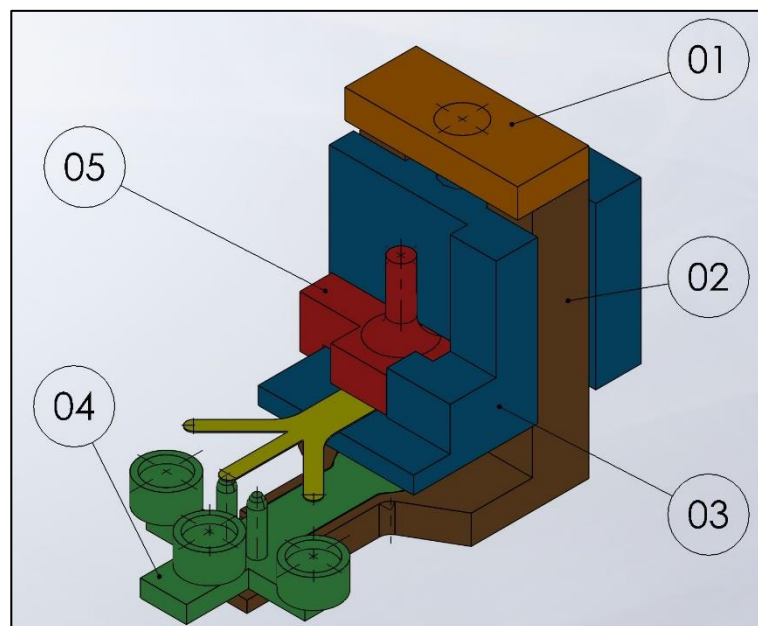
Il·lustració 18: Esquema general del protocol seguit en el testeig dels dispositius de mesura – Font: Autor

## 6. Anàlisi del mecanisme d'accionament manual

### 6.1 Descripció del mecanisme d'accionament

Per a la realització de les proves de fluid amb els sensors de pH s'ha utilitzat un dispositiu "mecànic" no motoritzat format per peces de plàstic ABS i fabricat a partir d'impressió 3D, el qual transforma moviment rotatiu en moviment lineal per tal de desplaçar el sensor de pH verticalment i possibilitar el contacte entre reactiu i substrat.

A la següent il·lustració es mostra la vista isomètrica del mecanisme **6S\_DEVICE\_H01\_6**, el qual ha estat l'últim disseny de mecanisme fabricat, amb el qual s'ha aconseguit repetibilitat amb les proves de fluid. Es destaquen les peces integrants del mecanisme:



*Il·lustració 19: Mecanisme definitiu de sincronització pels sensors amb les parts integrants numerades (6S\_DEVICE\_H01\_6) – Font: Autor*

En referència a la il·lustració 19 anterior, s'anomenen les diferents parts integrants del mecanisme de sincronització a la següent taula:

MARCA	DESCRIPCIÓ	QUANTITAT	MATERIAL
01	<b>Tapa superior:</b> Serveix de topall per al moviment de la peça mòbil	1	ABS
02	<b>Cos principal:</b> Es tracta de la peça principal sobre la qual es munten la resta	1	ABS
03	<b>Peça mòbil:</b> Encarregada de transmetre el moviment vertical al sensor de paper	1	ABS
04	<b>Dipòsit de fluid:</b> Permet dipositar els reactius per la realització de l'assaig	1	ABS
05	<b>Contrapès del sensor:</b> Subjecta i manté fix el sensor de paper	1	ABS

*Taula 4: Numeració i descripció de les peces integrants del mecanisme 6S\_DEVICE\_H06 – Font: Autor*

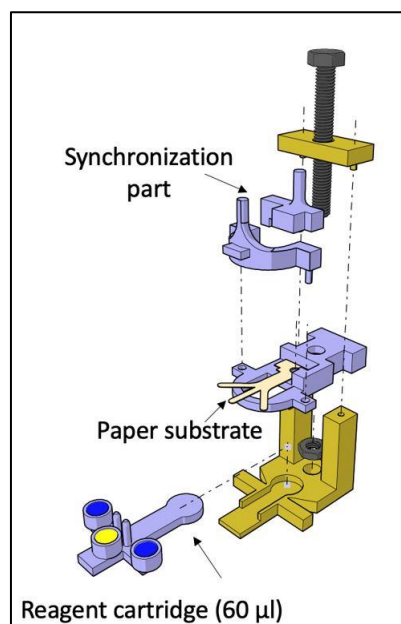
La peça principal del mecanisme (**02**) actua com a guia per al moviment vertical del sensor i serveix de suport pels reservoris on es dipositen els reactius.

Pel guiat de la peça principal llisca la peça mòbil (**03**), a la qual s'hi subjecta el sensor per mitjà d'un encaix. L'encaix incorpora un sortint a la seva part inferior, concèntric amb el forat situat a la base dels sensors, minimitzant així el moviment del sensor durant l'accionat del mecanisme (la base del sensor incorpora un forat per quedar totalment subjecte al mecanisme).

La transmissió del moviment es realitza per mitjà d'una rosca i un espàrrec M6, els quals en conjunt funcionen com un moviment de sense fi - corona.

L'accionament del mecanisme s'executa de manera manual. Amb la mà es gira el cargol i en roscar produeix el moviment vertical de la peça mòbil, movent-se així el sensor fins a l'alçada desitjada.

A la il·lustració 20 s'observa la vista "explosionada" del mecanisme de sincronització **5S\_DEVICE\_H01\_5**, en la qual si distingeixen les zones principals del sensor i permet intuir el muntatge manual de les diferents peces.



*Il·lustració 20: Vista "explosionada" del mecanisme de sincronització 5S\_DEVICE\_H01\_5, amb les principals parts destacades – Font: López Martínez, Joan Antoni*

## 6.2 Avantatges i inconvenients del mecanisme actual

El mecanisme de sincronització ha patit diverses modificacions al llarg de l'estudi, incorporant el redisseny de certes peces per tal d'aconseguir la màxima repetibilitat als experiments. Tanmateix, totes les versions del mecanisme segueixen el mateix principi de funcionament.

De manera conjunta per totes les versions realitzades del mecanisme, podem destacar-ne els següents avantatges i inconvenients:

AVANTATGES	INCONVENIENTS
Fàcil d'accionar (mecanisme molt simple)	Mecanisme amb poca precisió (presència de tremolors en el moviment)
Producció de les peces poc costosa. Possibilitat de <i>try &amp; error</i> (s'ha tingut accés a una impressora 3D personal)	Sistema poc sofisticat vers el procediment que es necessita realitzar ( <b>sensors de pH molt delicats</b> )
Fàcil de desmuntar i emmagatzemar (dimensions reduïdes), així com és fàcilment transportable.	Depenent del factor humà (velocitat de pujada i baixada no repetitives)
El dipòsit és una peça extraïble, la qual cosa permet la utilització del mecanisme en altres assajos simultanis amb altres dipòsits, abaratint el cost final de l'assaig	Toleràncies en impressió 3D força variables. Desconeixement de les dimensions finals que tindran les peces.

*Taula 5: Avantatges i inconvenients del mecanisme de sincronització actual pels sensors – Font: Autor*



Tot i que el mecanisme ofereix certs avantatges, podem veure com es tracta d'un sistema que, tot i ser fàcil de fabricar i per al nostre cas barat, incorpora certa variabilitat al procés.

Els aspectes negatius, com ara les tremolors presents en el moviment vertical del sensor, la variabilitat de la velocitat en el seu accionament i la poca precisió de les toleràncies (de vegades hi ha joc excessiu i d'altres massa poc), fa que sigui molt difícil poder obtenir una certa repetibilitat en les proves de fluid, a causa de la gran quantitat de variables presents intrínseques el mecanisme utilitzat.

Tanmateix, al llarg de l'estudi s'ha buscat redissenyar algunes de les peces del mecanisme d'accionament, arribant a una solució final amb la qual s'ha aconseguit repetibilitat en les proves, partint de la base de què no es tracta del dispositiu més adequat.

### **6.3 Millores aplicades al mecanisme de sincronització durant la realització de l'estudi**

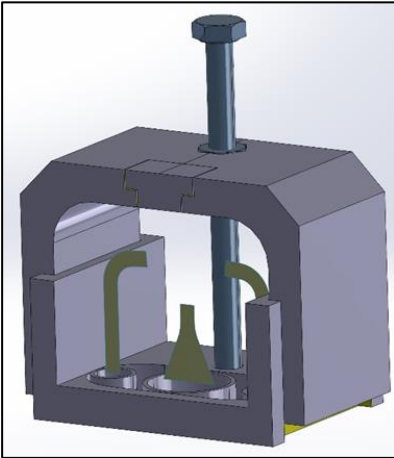
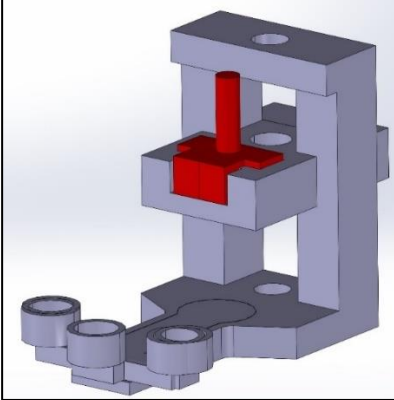
Al llarg de l'estudi s'han realitzat diverses modificacions del mecanisme de sincronització per tal d'augmentar-ne al màxim la seva eficàcia i dotar als experiments de la repetibilitat necessària per a l'obtenció de resultats rellevants.

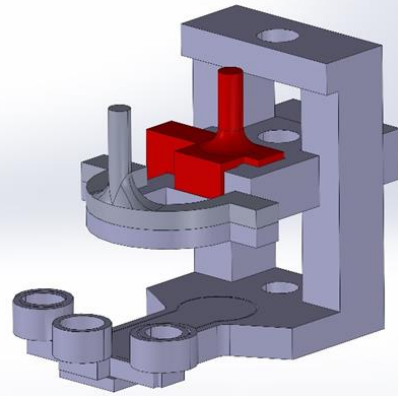
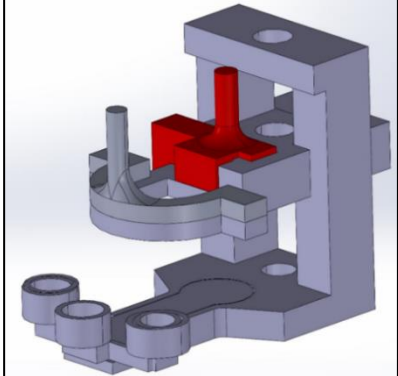
S'adjunta a les pàgines següents la taula on es mostren els diferents mecanismes fabricats al llarg de l'estudi<sup>2</sup>, junt amb una breu descripció i els principals inconvenients trobats.

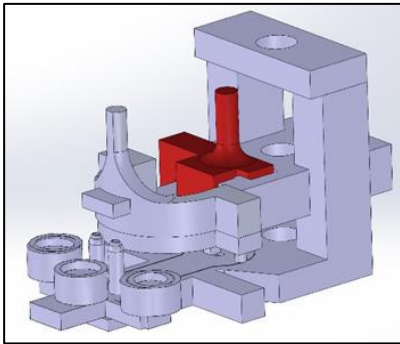
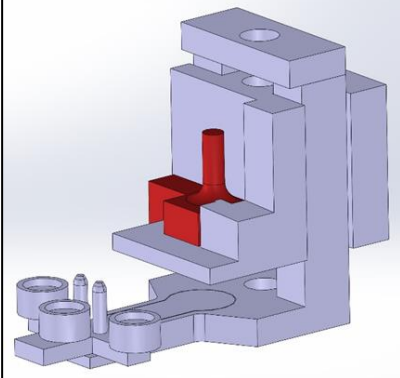
---

<sup>2</sup> Ja que no s'ha pogut accedir a les instal·lacions de l'ESEIAAT, no s'adjunten les fotografies dels mecanismes fabricats. Tanmateix, algunes de les fotografies adjuntades a la present memòria en demostren la seva fabricació.



	II-lustració 3D	Característiques principals	Inconvenients detectats
1S_DEVICE_V01		<ul style="list-style-type: none"> <li>- Disseny primerament fabricat (abans de l'inici de l'estudi)</li> <li>- Posició vertical del sensor durant el seu descens</li> <li>- La posició dels contenidors és manual: es pot variar la seva posició (no fixes)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Forces gravitacionals &gt; forces capil·lars</li> <li>- Difusió excessivament lenta del flux a través del substrat</li> <li>- El flux no arriba a la zona central per la difusió entre reactius</li> <li>- Contenidors amb diferents dimensions (quantitat de reactiu diferent)</li> </ul>
2S_DEVICE_H01		<ul style="list-style-type: none"> <li>- Primer mecanisme de sincronització dissenyat per al present estudi</li> <li>- Primer disseny en què el sensor es troba en posició horitzontal durant el seu moviment</li> <li>- Dipòsit fix</li> <li>- Sensor encaixat "dins" la peça mòbil</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Joc excessiu que provoca tremolors a l'hora d'accionar el cargol de gir</li> <li>- Poca repetibilitat dels experiments</li> <li>- Deformació del sensor a l'hora d'inserir-lo dins l'encaix (inserció poc òptima)</li> </ul>

<p><b>3S_DEVICE_H01_1</b></p>		<ul style="list-style-type: none"> <li>- La peça mòbil permet la inserció lateral del sensor. Ara ja no es malmet</li> <li>- Fabricació d'un contrapès davanter per sincronitzar el contacte entre substrat i reactius</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Es produeix difusió dels reactius a través de les fibres de plàstic del contrapès davanter</li> <li>- Difusió no simètrica</li> <li>- Toleràncies dimensionals excessives</li> </ul>
<p><b>4S_DEVICE_H01_4</b></p>		<ul style="list-style-type: none"> <li>- Reajust de les toleràncies dimensionals</li> <li>- Es prova de nou la funcionalitat del contrapès davanter</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Millor funcionament del mecanisme amb les noves toleràncies</li> <li>- El contrapès aplanar la superfície del substrat, però permet la difusió a través de les seves fibres (no sincronització)</li> </ul>

5S_DEVICE_H01_5		<ul style="list-style-type: none"> <li>- Tapa superior extraïble</li> <li>- Peça mòbil “monobloc” (abans formada per 2 peces)</li> <li>- Incorporació de sortints al contrapès davanter</li> <li>- Incorporació d'un centrador davant del contenidor central</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Els sortints no donen estabilitat suficient al punt inferior del moviment</li> <li>- Al retirar el sensor, aquest torna a entrar en contacte amb el contrapès (apareix la possibilitat de deixar el sensor en contacte permanent amb els reactius)</li> <li>- S'aprecia encara un cert joc en el moviment</li> </ul>
6S_DEVICE_H01_6		<ul style="list-style-type: none"> <li>- Augment de la secció de la peça mòbil</li> <li>- Augment del diàmetre dels orificis</li> <li>- Prèviament els sensors es planxen</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- El mecanisme mostra repetibilitat amb la 6<sup>a</sup> configuració</li> </ul>

Taula 6: Principals característiques i inconvenients trobats en els 6 mecanismes de sincronització dissenyats i fabricats al llarg de l'estudi – Font: Autor

Al document **ANNEX II: DISSENY DEL MECANISME D'ACCIONAMENT MANUAL**, lliurat conjuntament amb el present document, s'explica en profunditat la tasca de disseny realitzada sobre el mecanisme de sincronització pel substrat dels sensors, detallant els inconvenients trobats així com les solucions que s'han anat adoptant fins a arribar a la 6<sup>a</sup> i última solució per la realització d'aquest estudi.

## 7. Càlculs d'Ansys Fluent. *Grid Independency Analysis*

*Ansys Fluent* és un *software* que permet la realització de simulacions del moviment de diversos fluids a partir de la resolució de les equacions de **Navier-Stokes**, les quals aplicades per medis porosos esdevenen la Llei de difusió de **Darcy**. Pel que fa a la difusió de fluids, *Ansys Fluent* es basa en les lleis de difusió de **Fick** per al càlcul i predicció de la difusió dels reactius al llarg de la superfície del sensor.

El *software* s'ha utilitzat per analitzar el comportament de diferents dissenys de sensors per tal de comprovar-ne l'amplada de difusió generada a la seva zona central en funció de la seva geometria, així com el comportament global del sensor davant la difusió dels reactius per tal d'arribar al disseny òptim i posteriorment procedir al seu tallat làser.

La realització d'un mallat apropiat previ als càlculs iteratius és vital per tal d'obtenir resultats coherents a l'hora que rellevants per al posterior postprocessat de dades i comparació amb els resultats experimentals. Així doncs, es realitza l'estudi de la independència de quadrícula o ***Grid Independency Analysis***, a partir del qual es determina el mallat òptim per la simulació dels diferents dissenys de sensor realitzats en el present estudi.

En aquest apartat es busca realitzar l'explicació tècnica de totes aquelles equacions i càlculs que realitza el programari davant un problema resolt pel model de càlcul *Viscous – Laminar*, així com les consideracions i simplificacions aplicades a causa de les característiques intrínseques al nostre sistema en particular.

Tots els passos realitzats en la configuració del model de càlcul, així com els gràfics obtinguts pels diferents dissenys i variants dels sensors s'expliquen de manera detallada al document **ANNEX III: PASSOS REALITZATS EN LA SIMULACIÓ DELS SENSORS – RESULTATS OBTINGUTS**.

L'explicació dels càlculs i operacions realitzades per part del codi CFD (*Computational Fluid Dynamics*) explicades als següents apartats s'han realitzat a partir del manual tècnic d'*Ansys Fluent*.

### 7.1 *Grid Independency Analysis*

Les equacions de Navier-Stokes, resoltes pel codi CFD d'*Ansys Fluent* a les simulacions són de caràcter no lineal, pel que és essencial basar-se en un estudi per elements finits per tal d'obtenir resultats fidels a la realitat que permeti conèixer el comportament del dispositiu de mesura davant el sí microfluídic abans de la seva fabricació, minimitzant costos i temps de fabricació.

Així doncs, el mallat és una operació clau en la realització de les simulacions amb *Ansys Fluent* i en general en qualsevol *software* que es basi en elements finits a l'hora de realitzar els càlculs, ja que els càlculs realitzats els fa individualment per cadascuna de les cel·les discretitzades en l'operació de mallat.

Pel motiu anterior se sol realitzar un estudi de la independència de quadrícula en els mallats, per tal d'obtenir els paràmetres de mallat òptim, aplicant-los repetidament per les simulacions dels diferents dissenys de sensor, sabent que aquests canvien la seva morfologia però la superfície del cos és pràcticament la mateixa, de manera que es poden aplicar les mateixes dimensions de cel·la.

Pel que fa a la metodologia seguida, s'ha decidit iniciar els mallats amb poca finor (2 mm), i progressivament anar doblant la malla fins a aconseguir una diferència del valor

de caiguda de pressió entre entrada i sortida del sensor entre mallats  $\leq 5\%$ . Un cop obtinguda aquesta diferència mínima, es realitzen 3 malles més, doblant-se l'espessor de malla en cadascuna d'elles. La variable escollida ha estat la caiguda de pressió, de la qual s'ha seleccionat el valor màxim obtingut per la realització dels càlculs.

En la realització dels càlculs s'ha emprat l'expressió utilitzada a l'article (Cfd, 2018), la qual és adequada per geometries amb canvis de secció abruptes i d'aquesta manera, aplicable a les diferents versions del sensor simulades.

L'equació emprada ha estat:

$$\varepsilon_{i,rel} = \frac{p_i(\text{corser mesh}) - p_i(\text{finest mesh})}{p_i(\text{finest mesh})} \times 100$$

*Equació 2: Càlcul de l'error relatiu per l'optimització del mallat – Font: (Cfd, 2018)*

essent:

$\varepsilon_{i,rel}$  : error relatiu de la variable escollida per la cel·la discretitzada i [%]

$p_i(\text{corser mesh})$  : valor de la caiguda de pressió per la malla no fina [Pa]

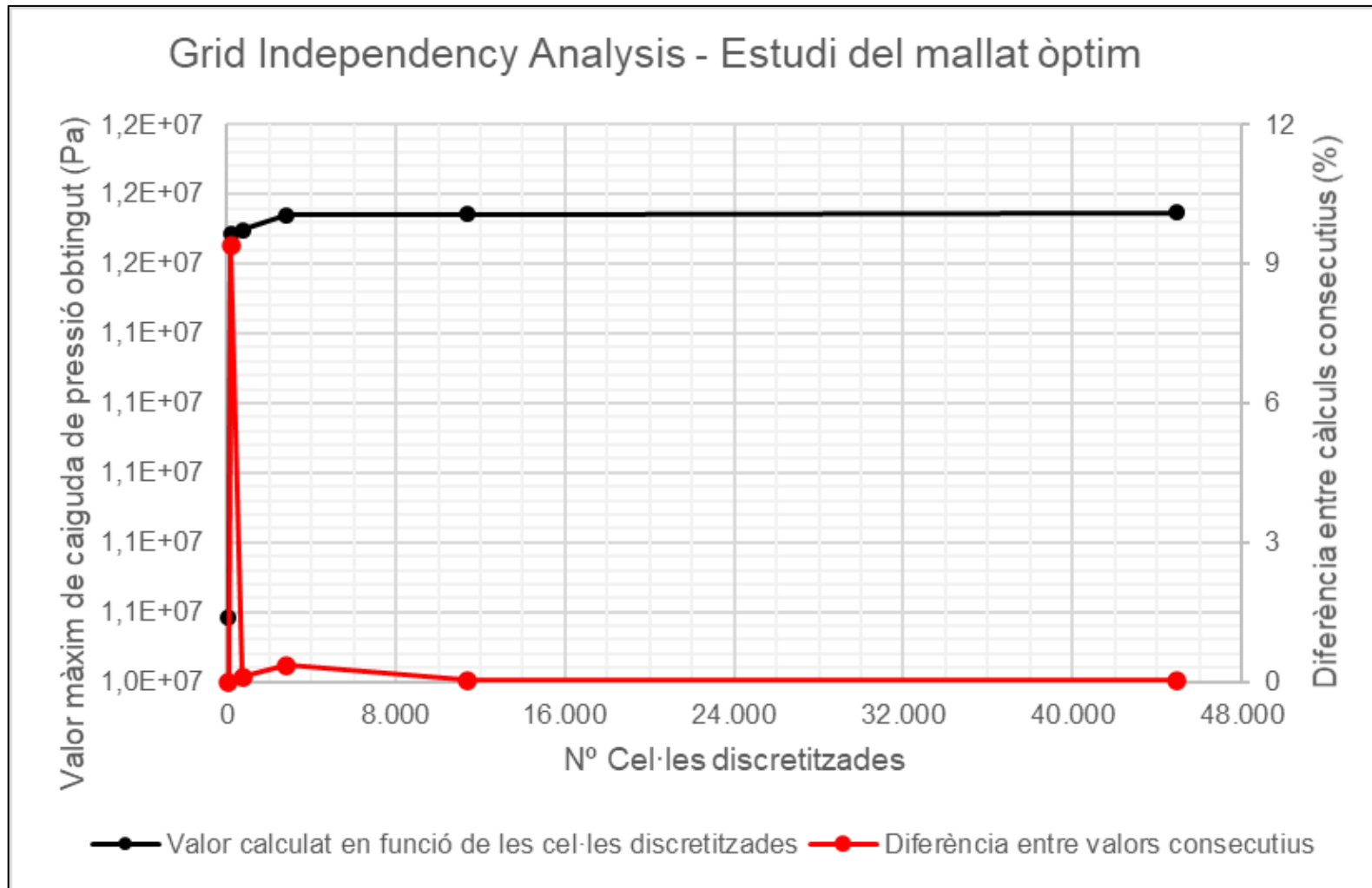
$p_i(\text{finest mesh})$  : valor de la caiguda de pressió per la malla fina (doble de fina que l'anterior) [Pa]

A partir dels càlculs realitzats seguint l'equació anterior per diferents simulacions consecutives i doblant el mallat, s'obtenen els valors presentats a la taula següent:

GRID INDEPENDENCY ANALYSIS					
Nº simulació	Defeature Size [mm]	Element Size [mm]	$\nabla P_{(x+1) - x}$ [Pa]	$\varepsilon_{i,rel}$ [%]	Resultat
1	2	1	--	--	--
2	1	0,5	1100000	9,41	NO OK
3	0,5	0,25	12600	0,11	OK
4	0,25	0,125	41100	0,35	OK
5	0,125	6,25 E-02	4200	0,04	OK
6	6,25 E-02	3,13 E-02	2700	0,02	OK

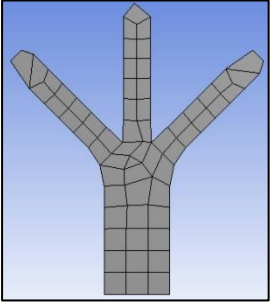
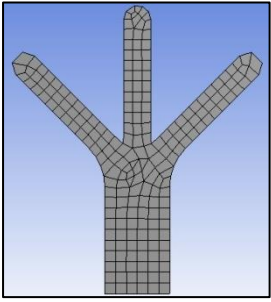
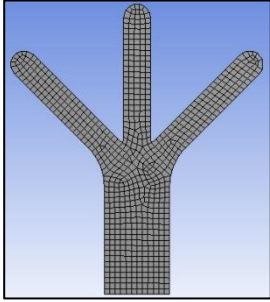
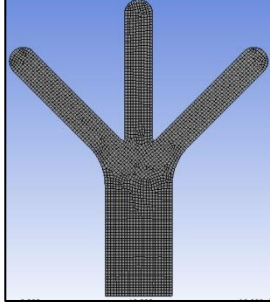
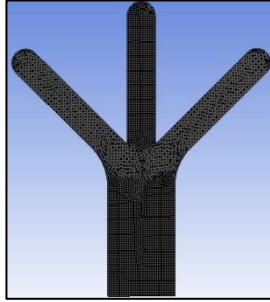
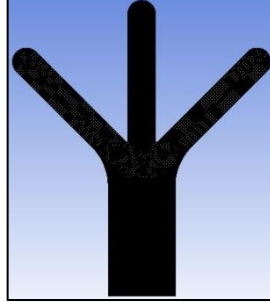
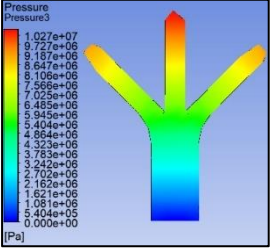
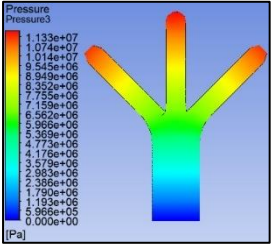
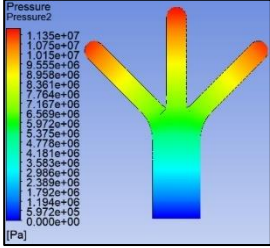
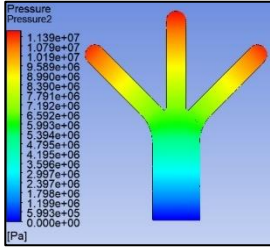
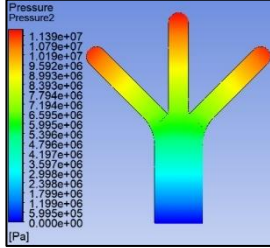
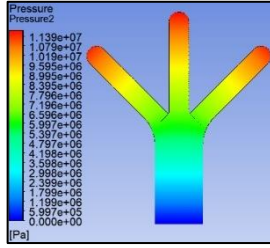
*Taula 7: Valors de caiguda de pressió obtinguts a partir de la realització de l'anàlisi per quadrícules desenvolupat amb Ansys Fluent – Font: Autor*

Es presenta a la pàgina següent la gràfica del comportament dels resultats dels mallats realitzats, observant-se com els resultats s'estabilitzen entre la 3ª i 4ª simulació, pel que el model convergeix ràpidament.



Il·lustració 21: Gràfic que mostra l'evolució del valor de caiguda de pressió màxim calculat vers el nombre total de cel·les discretitzades – Grid Independency Analysis – **Font:** Autor

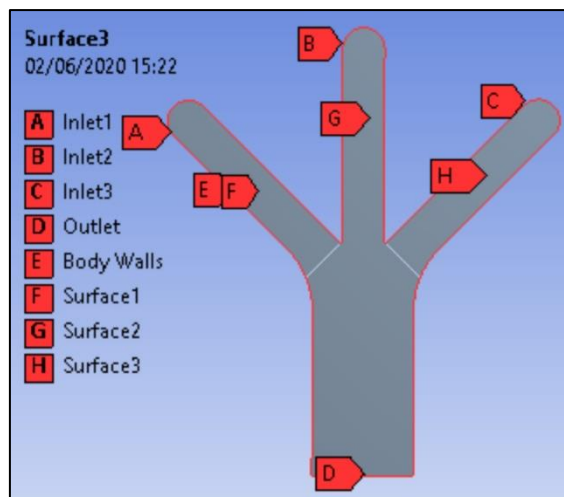
Es mostra a continuació una taula comparativa amb els mallats realitzats per l'anàlisi d'independència de quadrícula, observant-se l'evolució en la finor del mallat i els resultats corresponents:

EVOLUCIÓ DE LA MALLA I ELS RESULTATS OBTINGUTS					
MALLAT					
1	2	3	4	5	6
					
RESULTATS					
					

Taula 8: Evolució de la malla i els resultats obtinguts de caiguda de pressió al llarg de la resolució de la Grid Independency Analysis – Font: Autor



Un cop definida la malla, el model també necessita tenir definides les condicions de contorn (**Boundary Conditions**) del model simulat, a partir de les quals el *software* realitza els càlculs. Es mostra a la il·lustració 22 les condicions de contorn escollides per la realització de les simulacions, les quals sempre han estat les mateixes independentment de les variants de sensor.



Il·lustració 22: Boundary Conditions nomenades durant la realització del mallat per les diferents simulacions (es presenta un cas particular d'un sensor v7 a 45°) – Font: Autor

S'indica a la taula següent les diferents seleccions geomètriques nomenades com a condicions de contorn i la funcionalitat que desenvolupen a l'hora de configurar els paràmetres de càlcul:

LIMITANTS GEOMÈTRICS DE CONTORN	
Condicció de contorn	Funcionalitat
<b>Inlet 1</b>	Aresta per on es produeix la penetració del reactiu del conducte esquerre. Ens permet realitzar el <i>setting</i> de la velocitat inicial d'entrada del fluid
<b>Inlet 2</b>	Aresta per on es produeix la penetració del reactiu del conducte central. Ens permet realitzar el <i>setting</i> de la velocitat inicial d'entrada del fluid
<b>Inlet 3</b>	Aresta per on es produeix la penetració del reactiu del conducte dret. Ens permet realitzar el <i>setting</i> de la velocitat inicial d'entrada del fluid
<b>Outlet</b>	Aresta que delimita la zona de difusió del sensor amb la base del dispositiu. No actua com a sortida realment, sinó que se l'anomena d'aquesta manera per la practicitat a l'hora de desenvolupar el model
<b>Body Walls</b>	Són tot el conjunt d'arestes exteriors a excepció de les anteriors. Impossibiliten que el fluid circuli més enllà de la superfície del substrat
<b>Surface 1</b>	Zona de la superfície corresponent al conducte esquerre, des de l'entrada per l'inlet 1 fins abans d'arribar a la zona central de difusió
<b>Surface 2</b>	Zona de la superfície corresponent al conducte central, des de l'entrada per l'inlet 2 fins a l'outlet
<b>Surface3</b>	Zona de la superfície corresponent al conducte dret, des de l'entrada per l'inlet 3 fins abans d'arribar a la zona central de difusió

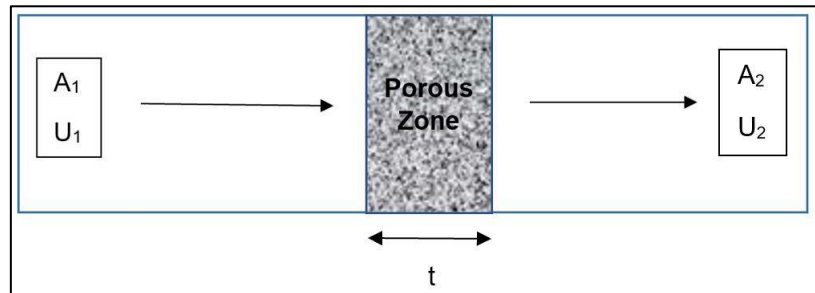
Taula 9: Funció dins el codi CFD de les diferents condicions limitants de contorn insertades per la resolució del model – Font: Autor

Remarcar el motiu de la definició de 3 zones diferenciades dins la totalitat de la superfície del sensor, la qual s'ha realitzat per fer possible la definició posterior de 3 direccions diferents de difusió del fluid, necessària a causa de la inclinació que mostren els conductes laterals vers el central.

## 7.2 Càlculs del codi CFD d'Ansys Fluent

El present apartat explica les equacions emprades pel codi CFD d'Ansys Fluent per la resolució de qualsevol sistema en què el fluid d'estudi circula per una o diverses zones poroses, pel que les equacions aquí explicades són les genèriques per qualsevol model de càlcul. A més, es detallen les equacions simplificades a causa de les característiques intrínseques del nostre model en particular.

Plantegem a continuació un cas senzill a la il·lustració 23, per entendre com afecta una zona porosa d'un gruix determinat  $t$  a un flux de fluid amb velocitat del front de flux  $U$ :



*Il·lustració 23: Exemple il·lustratiu de l'aplicació de la conservació de la massa per un fluid que travessa en direcció transversal un medi porós –  
Font: Dr. Aidan Wimshurst – Adaptat per: Autor*

Si considerem les àrees a l'entrada i la sortida iguals, així com densitat del fluid constant al llarg del seu recorregut (considerem temperatura homogènia per tot el fluid) i apliquem conservació de la massa (continuitat), obtenim:

$$A_1 = A_2$$

$$\rho * U_1 * A_1 = \rho * U_2 * A_2$$

$$U_1 = U_2$$

*Equació 3: Continuitat i conservació de la massa*

essent:

$A_1$  = Àrea transversal respecte el front del fluid abans d'entrar a la zona porosa

$U_1$  = Velocitat mitja del front del fluid abans d'entrar a la zona porosa

$A_2$  = Àrea transversal respecte el front del fluid a la sortida de la zona porosa

$U_2$  = Velocitat mitja del front del fluid a la sortida de la zona porosa

$\rho$  = Densitat del fluid (cte)

$t$  = gruix de la zona porosa en la direcció del flux del fluid

Així doncs, entenent el fluid d'estudi com un material incompressible, i trobant-nos sota un sistema no pressuritzat, podem concloure que la velocitat mitja del front de fluid a l'entrada ( $U_1$ ) serà exactament igual que a la sortida ( $U_2$ ).

De la deducció anterior podem extreure una conclusió física rellevant per tal d'entendre com es veu afectat el fluid en penetrar dins una zona o cos porós: **La zona porosa, entenent-la com una obstrucció al fluid (al seu moviment), no elimina l'energia cinètica del fluid, sinó que la zona porosa, en el nostre cas, la superfície del paper *Whatman* que actua com a sensor de pH, genera una caiguda de pressió sobre el front del fluid  $\nabla p$ .**

Així doncs, la zona porosa no extreu energia cinètica del moviment del fluid, sinó que absorbeix la seva energia en forma de caiguda de pressió.

En la majoria dels casos, la caiguda de pressió  $\nabla p$  que es donarà en un cos porós no és coneguda. A partir de l'experimentació científica amb superfícies i cossos porosos, s'ha pogut concloure que la velocitat del front del fluid i la caiguda de pressió a la zona porosa guarden una relació directament proporcional, és a dir, com més gran sigui la velocitat del fluid, més gran serà la caiguda de pressió al "travessar" la zona porosa (més energia extreu la zona porosa del fluid). El fet anterior s'ha pogut comprovar a les proves experimentals realitzades durant aquest estudi, posant-se de manifest a l'apartat **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** d'aquest document.

Sabent la proporcionalitat existent entre les variables de velocitat i caiguda de pressió, es pot parametritzar la caiguda de pressió  $\nabla p$  a partir d'un terme polinòmic tenint com a element comú la velocitat del front del fluid  $U$ :

$$\nabla p = C_1 * U + C_2 * U^2 + C_3 * U^3 + C_4 * U^4 + C_5 * U^5 + \dots$$

*Equació 4: Expressió polinòmica d'ordre N amb la qual es pot parametritzar la caiguda de pressió soferta per un fluid, coneixent la velocitat amb la qual circula aquest*

Per la gran majoria d'estudis de caràcter científic focalitzats en sistemes microfluídics, s'acostumen a seleccionar els termes lineal i quadràtic de l'expressió polinòmica, essent la resta menyspreables vers l'obtenció dels resultats finals.

Per a estudis en zones poroses, és comú utilitzar la Llei de Darcy, la qual és adequada per medis continus i isotròpics. La llei de Darcy sol expressar-se en forma de *dynamic head*, tal com es mostra a continuació:

$$\nabla p = C_1 * U + C_2 * \frac{1}{2} \rho * U^2$$

*Equació 5: Llei de Darcy expressada en forma de **dynamic head***

essent:

$\nabla p$ : caiguda de pressió generada sobre el front del fluid en conseqüència del seu moviment al llarg del paper [Pa]

$U$ : velocitat del front del flux  $\left[\frac{m}{s}\right]$

$\rho$ : densitat del fluid  $\left[\frac{m^3}{Kg}\right]$

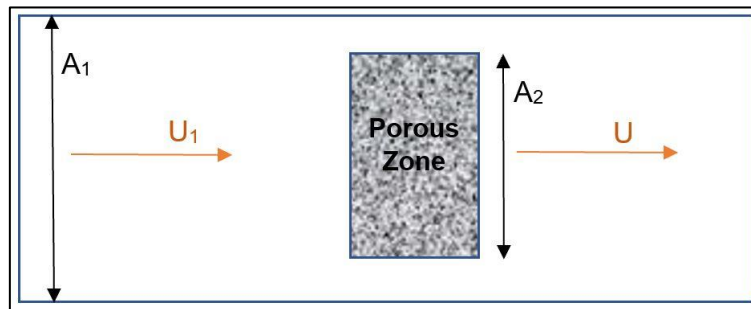
$C_1$ : constant associada al terme lineal del polinomi

$C_2$ : constant associada al terme quadràtic del polinomi

Posteriorment es detalla el significat físic i les unitats dels coeficients  $C_1$  i  $C_2$  anteriors.

Un cop presentada l'equació anterior, on el terme lineal fa referència a les forces viscoses generades sobre el front de flux i el segon terme (quadràtic) a les forces inercials, és important conèixer exactament quina velocitat és la que ens interessa introduir a la variable  $U$  a l'hora d'obtenir els coeficients  $C_1$  i  $C_2$  i així poder introduir-los al programa d'*Ansys Fluent* per a les nostres simulacions.

Per tal d'explicar el terme  $U$  presentat a l'equació 4, plantejem la següent situació d'estudi a la il·lustració 24:



*Il·lustració 24: Exemple il·lustratiu per l'explicació del terme  $U$ , corresponent a la velocitat del front del fluid – Font: Dr. Aidan Wimshurst – Adaptat per: Autor*

Per al cas plantejat anteriorment, on l'àrea de la zona porosa ( $A_2$ ) és més petita que l'àrea per on circula el fluid abans de penetrar a la zona porosa ( $A_1$ ), podem definir  $U_1$  com la velocitat mitja a la qual es mou el volum total del fluid estudiat, mentre que la velocitat a través de la zona porosa  $U$  és la utilitzada a la funció polinòmica anterior per al càlcul de la caiguda de pressió.

És important definir correctament la velocitat amb la qual circula el flux a través del cos porós, ja que a partir de la velocitat utilitzada, els coeficients de simulació  $C_1$  i  $C_2$  variaran i per tant els resultats obtinguts a les simulacions també ho faran. És necessari utilitzar la velocitat del flux a través de la zona porosa  $U$ , no la velocitat mitja amb la qual circula el flux abans de penetrar el cos porós  $U_1$ .

En cas contrari, usant la velocitat mitja del volum global del fluid ( $U_1$ ), l'expressió per determinar la caiguda de pressió  $\nabla p$  no s'estarà usant de manera correcta, ja que a la zona porosa només l'afecta la velocitat deguda a la caiguda de pressió a les seves bores, és a dir, únicament la velocitat del front, que és la part del flux en entrar en contacte abans amb el medi porós, i no pas la velocitat global del volum de fluid que circula pel cos o superfície de control.

Ara bé, els casos plantejats anteriorment estan pensats per explicar el concepte de la velocitat a través de la zona porosa  $U$  per qualsevol sistema, independentment dels canvis de secció, gruixos, materials... que hi puguin haver en qualsevol problema plantejat.

Tanmateix, pel nostre problema en concret, el fluid reposa sobre els contenidors del dipòsit del mecanisme de sincronització, els quals es troben en règim estacionari i per tant,  $U = 0$ . Així doncs, el fluid no entra en contacte amb algun altre cos/superfície més que amb la superfície del paper Whatman. El fluid és absorbit pel paper quan es produeix el contacte substrat-reactiu, ja que per al nostre sistema  $F_{capilars} \gg F_{gravitacionals}$ , i aquest comença a "córrer" per la superfície del substrat.

El fluid en cap moment surt de la superfície del paper, el qual té gruix constant, de manera que, per al nostre model en concret, tenim que:

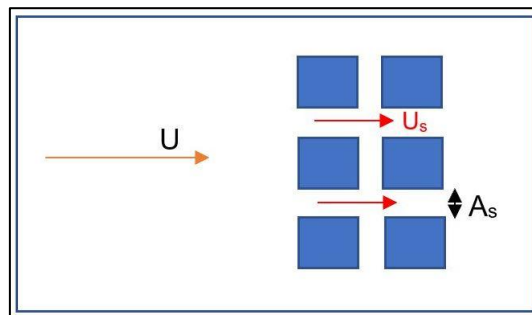
$$U_1 = U$$

En el nostre sistema, **el fluid només circula a través de la superfície del substrat de paper, sense patir canvis de secció**. (secció transversal respecte el front de flux).

Per acabar de concretar el sentit físic i teòric de la variable  $U$ , també establim la diferència entre  $U$  i la velocitat superficial del fluid  $U_s$ .

Si mirem d'“apropar-nos” a escala microscòpica a l'estructura fibrosa del paper *Whatman*, a través dels porus del substrat és necessari diferenciar la velocitat del front a través del cos porós i la velocitat superficial d'aquest.

Per una millor entesa del concepte de  $U_s$  i la diferència amb la velocitat a través de l'àrea porosa  $U$ , es presenta la il·lustració 25:



*Il·lustració 25: Exemple il·lustratiu per l'explicació de la diferència entre  $U$  i  $U_s$  – Font: Dr. Aidan Wimshurst – Adaptat per: Autor*

Per al nostre cas en concret, la zona porosa (zona d'obstrucció al moviment del flux) està formada per la totalitat de la superfície del sensor de pH.

La densa estructura fibrosa del paper, o dit d'una altra manera, la porositat del paper *Whatman*, genera una certa obstrucció a la velocitat del front del fluid, generant una pèrdua de pressió i absorbint així una certa quantitat d'energia del moviment del fluid, tal com s'ha mencionat anteriorment.

La velocitat amb la qual travessa el fluid la zona d'obstrucció l'anomenem  $U$ , però hem de ser conscients que  $U$  és una aproximació a la velocitat mitja que du el fluid a través de la zona porosa, i que dins ella, entre *gaps*, o en el nostre cas, porus del paper, es genera una velocitat superficial  $U_s$ , la qual és més gran que la mencionada  $U$  a causa de la reducció de la secció per on circula el flux del fluid, amb una corresponent acceleració d'aquest.

Així doncs, podem dir que la velocitat, almenys a escala local, tindrà un valor  $U_s$ , però per a la resolució de les equacions i trobar els coeficients  $C_1$  i  $C_2$ , usarem la velocitat mitjana al llarg de l'obstrucció  $U$  (valor global mig dins la zona porosa), la qual és calculable a nivell experimental i es tracta d'una aproximació de la velocitat mitjana global del flux de fluid mentre aquest travessa la zona porosa.

Després dels aclariments anteriors, podem doncs explicar la resolució que fa l'*Ansys Fluent* a les simulacions, a través de l'aplicació de les Equacions de Navier-Stokes, les

quals esdevenen la Llei de difusió de Darcy per medis porosos, així com quin és el procés que realitza el codi del CFD per tal de resoldre-les de manera eficient.

Ansys aplica les equacions de **Navier-Stokes** per la conservació de continuïtat i moment. Les equacions de Navier-Stokes són aplicades a sistemes microfluídics sota règim laminar (Llei de Darcy), com és el cas del nostre estudi.

Es presenten les equacions de conservació i continuïtat a escala macroscòpica (per qualsevol sistema d'estudi):

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0$$

$$\rho \left( \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{u}$$

*Equació 6: Equacions de Navier-Stokes aplicades a un sistema macroscòpic*

essent:

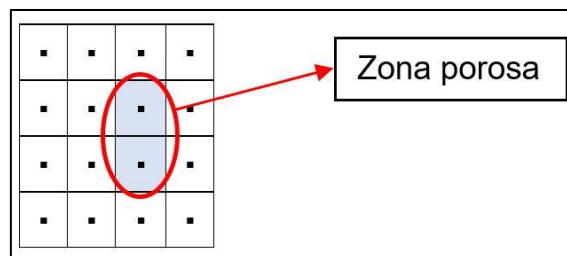
$U$ : velocitat del front del flux de fluid  $\left[ \frac{m}{s} \right]$

$\rho$ : densitat del fluid  $\left[ \frac{m^3}{Kg} \right]$

$\nabla p$ : caiguda de pressió generada sobre el front del fluid en conseqüència del seu moviment al llarg del paper  $[Pa]$

Per diferenciar les zones poroses de les que no ho són, el codi de resolució d'Ansys hi suma un *source term* **S** a les equacions de Navier-Stokes.

L'*scanning* que realitza *Ansys Fluent* a l'hora de detectar les cel·les que es troben en medi porós es mostra de manera simplificada a la il·lustració 26:



*Il·lustració 26: Exemple il·lustrat d'un quadrat 4x4 de les cel·les d'un mallat. Representades en fons blau i encerclades en vermell un conjunt de 2 cel·les en zona porosa – Font: Dr. Aidan Wimshurst – Adaptat per: Autor*

El programari realitza els càlculs a la part central de cadascuna de les cel·les (simbolitzades amb punts a la il·lustració anterior) i filtra aquelles cel·les que es trobin en zona porosa, afegint el terme **S** a les equacions de Navier-Stokes per totes aquelles cel·les poroses per tal de tindre en compte la caiguda de pressió generada en aquella cel·la en concret en motiu de la porositat presentada.

Per al nostre cas en particular, totes les cel·les del domini d'estudi es troben en zona porosa i per tant el *software* afegeix el terme **S** per cadascuna de les cel·les del nostre mallat en la seva totalitat. Es tracta d'una característica intrínseca del nostre estudi i en cap cas és genèrica a la resta de models.



El terme afegit  $S$  és la representació de totes aquelles acceleracions sofertes pel fluid d'estudi a causa de la presència del medi porós pel qual circula, és a dir, la caiguda de pressió soferta pel líquid amb motiu del seu moviment a través d'una zona porosa. Dit terme pren unitats de Força / volum, ja que tots aquells càlculs que realitza *Ansys Fluent* els multiplica pel volum local de les diferents cel·les d'estudi.

Per al present estudi ens basem en un sistema bidimensional ( $X, Y$ ), ja que el gruix del substrat del paper és mínim i per tant la difusió al llarg de l'eix  $Z$  és menyspreable. Centrant-nos en l'eix  $X$ , es defineix la Llei de Darcy en la seva forma vectorial, aplicada per l'eix  $X$  de difusió (es tracta de la mateixa equació 5, mostrada anteriorment):

$$\nabla p_x = C_1 * U_x + C_2 * \frac{1}{2} * \rho |U| U_x$$

*Equació 7: Llei de Darcy en la seva forma vectorial, expressada per l'eix  $X$  de difusió*

essent:

$\nabla p_x$  = caiguda de pressió al llarg de l'eix  $X$

$C_1$  = constant corresponent al terme lineal de l'expressió polinòmica

$C_2$  = constant corresponent al terme quadràtic de l'expressió polinòmica

$U_x$  = velocitat mitja global del volum de fluid circulant a través de la zona porosa al llarg de l'eix  $X$

$|U|$  = velocitat mitja global del volum de fluid expressada en forma vectorial ( $2^{\text{n}}$  ordre)

$\rho$  = densitat del fluid que circula a través de la zona porosa

Centrant-nos a continuació en la força que rep el fluid, i recordant el sentit físic de la força: *Força = Pressió \* Àrea*, es mostra la següent equació de la força generada sobre el fluid al llarg de l'eix  $X$ :

$$F_x = -\nabla p_x * A = -\left(C_1 * U_x + C_2 * \frac{1}{2} * \rho |U| U_x\right) * A$$

*Equació 8: Força aplicada sobre el fluid amb motiu de les forces capil·lars generades pel substrat*

on les variables de l'equació presenten les mateixes unitats que a l'equació 5 anterior, amb  $\nabla p$  [Pa] i  $A$  [ $m^2$ ].

Pel que fa a l'àrea utilitzada a l'equació (8)  $A$ , aquesta és l'àrea frontal que troba el fluid al entrar en contacte amb la zona porosa, és a dir, aquella amb la que el fluid "xoca" en primera instància (secció transversal al moviment del flux).

El terme genèric  $S$  té unitats de força / volum, on el volum fa referència al volum de la cel·la que s'estigui calculant, de manera que l'equació que resolrà el programa per tal d'obtenir el valor del terme serà la presentada a continuació:

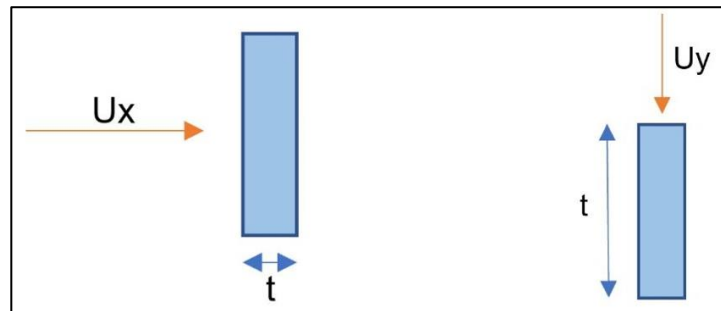
$$S_x = \frac{F}{V} = - \left( C_1 * U_x + C_2 * \frac{1}{2} * \rho * |U| U_x \right) * \frac{1}{t}$$

*Equació 9: Source Term  $S$  afegit a les equacions de Navier-Stokes per part del codi CFD per tal de comptabilitzar la caiguda de pressió generada pel substrat de paper, tenint en compte el volum de cel·la*

essent  $t$  [m] el gruix de la zona porosa **en la direcció del fluid que s'està considerant a l'hora de la realització del nostre estudi**, necessari per a la resolució del terme  $S$  per part del codi CFD.

A banda de les unitats de les variables ja presentades, tindrem:  $F \left[ N \equiv \frac{Kg \cdot m}{s^2} \right]$  i  $V [m^3]$ .

Per entendre de millor manera el valor que prendrà la variable  $t$ , es mostra la il·lustració 27 un exemple gràfic:



*Il·lustració 27: Exemple il·lustratiu del gruix de la zona porosa a travessar pel fluid, el qual depèn de la direcció que aquest tingui – Font: Dr. Aidan Wimshurst – Adaptat per: Autor*

A partir de la il·lustració anterior es pretén mostrar quin és el valor de gruix que s'ha d'inserir a les equacions en funció de la direcció del fluid que s'estigui estudiant, ja que, depenent de quin sigui l'eix d'estudi, el gruix del cos porós  $t$  serà un o altre (es tracta d'un exemple per entendre el significat del terme  $t$ , ja que per al nostre cas aquest sempre tindrà el mateix valor, el qual serà el gruix del substrat de paper).

Traient el factor comú del gruix del medi porós, multiplicant pels diferents termes de dins el parèntesi, obtenim l'equació 10:

$$S_x = - \left( \frac{C_1}{t} * U_x + \frac{C_2}{t} * \frac{1}{2} * \rho * |U| U_x \right)$$

*Equació 10: Source Term  $S$  amb el gruix del substrat multiplicat per cadascun dels termes lineal i quadràtic*

on les unitats de les variables d'incidència són les ja presentades en equacions anteriors.

Les unitats dels coeficients associats als termes lineal i quadràtic són:

$$\frac{C_1}{t} : \left[ \frac{Kg}{m^3 \cdot s} \right]$$

$$\frac{C_2}{t} : \left[ \frac{1}{m} \right]$$

Un cop determinats els coeficients  $C_1$  i  $C_2$ , el CFD pot calcular el terme  $S$  i així donar-li un valor de  $S$  a cadascuna de les cel·les que es trobin a la zona porosa, en el nostre cas totes elles, podent calcular així les equacions de Navier-Stokes per cadascuna de les cel·les de la nostra malla, tenint en compte la caiguda de pressió generada per la porositat del medi porós, en el nostre cas, el substrat de paper.

Per l'obtenció del valor del coeficient  $C_1$  s'aplica l'equació de Darcy, la qual és àmpliament utilitzada en estudis on es desitja analitzar el comportament del fluid en medis porosos, generalment per fluids amb un *Reynolds* baix, com és el nostre cas en particular al tractar-se d'un moviment laminar lent de fluid.

L'equació de Darcy s'ha presentat primerament a l'equació 5, en la qual s'han tingut en compte les forces inercials. Tanmateix, per al nostre model en concret, l'efecte d'aquestes són totalment menyspreables a causa del caràcter laminar del moviment del flux generat a través de la superfície del substrat, amb un *Reynolds* baix, així com la difusió isotròpica que es dona a la superfície del substrat, equitativa per ambdós eixos  $X$  i  $Y$ .

Així doncs, pel nostre model en particular, l'equació de Darcy es veu reduïda a:

$$\frac{dP}{dx} = \frac{\mu}{K} * U_x$$

*Equació 11: Llei de Darcy aplicada per medis porosos, expressada per l'eix  $X$  de difusió*

essent:

$\frac{dP}{dx}$  : diferencial de pressió produït en una petita porció del sensor de paper, al llarg de l'eix  $X$   $\left[\frac{Pa}{m}\right]$

$\mu^3$  : viscositat dinàmica del fluid  $\left[Pa * s \equiv \frac{Kg}{m*s}\right]$

$K$ : permeabilitat del substrat porós. També s'acostuma a designar la permeabilitat amb la lletra  $\alpha$   $[m^2]$

$U_x$  : velocitat del front del flux al llarg de l'eix  $X$  del sensor de paper  $\left[\frac{m}{s}\right]$

Comparant doncs l'equació de Darcy (11) amb l'equació polinòmica que determina la caiguda de pressió al llarg d'una superfície porosa (5), i tenint en compte el volum de la cel·la estudiada a partir del gruix del medi porós vers la difusió del fluid, podem establir la següent relació respecte del terme lineal:

$$\frac{C_1}{t} = \frac{\mu}{K}$$

*Equació 12: Comparació de la Llei de Darcy amb el terme lineal de l'expressió polinòmica de la caiguda de pressió, referent les forces viscoses*

essent les unitats de les variables les detallades amb anterioritat.

---

<sup>3</sup> Per aigua a 20 °C, el valor és de  $\mu = 0,001 \frac{Kg}{m*s}$ .

Així doncs, *Ansys Fluent* permet realitzar els càlculs iteratius a partir del valor  $\frac{C_1}{t}$ , o bé podem usar els valors de  $\mu$  i  $\alpha$  si els coneixem per tal d'inserir-los al codi CFD en comptes d'inserir directament el coeficient  $C_1$ . Al codi CFD del *software* **es demana directament la inversa de la permeabilitat del medi porós**, tot i que realment el que s'està inserint és el coeficient  $C_1$  de manera indirecta, relatiu a les forces viscoses.

Pel que fa a les forces inercials, aquestes es consideren menyspreables vers les viscoses a causa del caràcter laminar i isotròpic del model a resoldre. Les forces inercials estan vinculades al coeficient  $C_2$ , relatiu al terme quadràtic de l'expressió polinòmica inicial per al càlcul de la caiguda de pressió  $\nabla p$ .

Degut al domini de les forces viscoses derivades del caràcter laminar del moviment del flux, el valor de les forces inercials és totalment menyspreable (Fazin et al., 2019) i per tant, el valor introduït al codi CFD és 0.

Tenint en compte que el present estudi es realitza sobre un sistema bidimensional, *Ansys Fluent* du a terme la simulació en els 2 eixos cartesianes X i Y, de manera que haurem d'introduir els valors de la inversa de la permeabilitat del medi porós i les forces inercials (0) per cadascun dels eixos. Així doncs, tindriem  $C_{1x}$ ,  $C_{1y}$ ,  $C_{2x}$  i  $C_{2y}$ , un total de 4 coeficients per cadascuna de les zones poroses de què estigui format el nostre sistema.

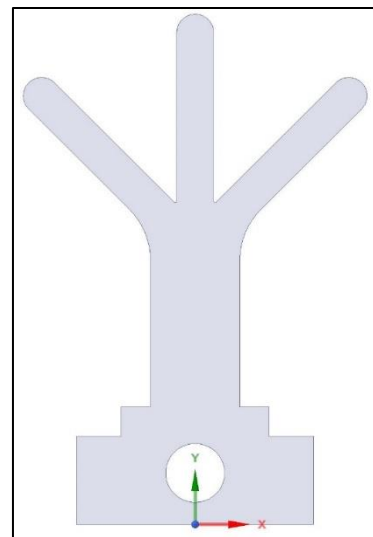
Degut al caràcter isotròpic del nostre model en particular, s'ha considerat la difusió equitativa en ambdós eixos i per tant:  $C_{1x} = C_{1y}$  (valor de la inversa de la permeabilitat – forces viscoses) i  $C_{2x} = C_{2y} = 0$  (forces inercials).

Com es menciona anteriorment, ens hem situat en el marc de la simulació 2D, tal com es mostra a la il·lustració 28, menyspreant d'aquesta manera la transmissió de fluid en l'eix Z. Així doncs, per la realització de les simulacions de la difusió de fluid hem treballat amb les dimensions X i Y, contemplant la difusió longitudinal (difusió molecular) i difusió transversal (dispersivitat mecànica), d'igual valor per un sistema isotròpic.

Pel que fa a la difusió dels reactius, el *software* resol la llei de difusió de **Fick** per la predicció i càlcul de la difusió al llarg del substrat del sensor, tal i com es menciona a l'apartat 3.2 d'aquest document.

En el moment en el qual es produeix el contacte entre la superfície del substrat del sensor i el reactiu, existeix una diferència en la concentració química (diferència de quantitat de les molècules del reactiu), ja que a l'extrem dels *inlets* existeix una certa concentració de reactiu, mentre que a la resta de la superfície del sensor la concentració de reactiu és 0.

Tal com defineix la llei de Fick per la constant de difusió **D**, a causa de la inestabilitat química es produeix el flux de difusió dels reactius a través dels conductes d'entrada del sensor de paper, ja que el flux es mou des de la zona d'elevada concentració a aquelles zones de poca concentració, produint-se un **gradient de concentració**.



Il·lustració 28: Vista en planta del model CAD pel sensor v7 amb conductes laterals inclinats 45° al workbench d'Ansys Fluent SpaceClaim – Font: Autor

Es mostra novament la llei de difusió de Fick, presentada a l'apartat mencionat, centrant-nos en la difusió dels reactius al llarg de l'eix X de la superfície del substrat, tot i que s'ha considerat un sistema isotròpic en la realització de les simulacions, produint-se la difusió en les dues dimensions de l'estudi X i Y per igual.

$$J = -D * \frac{\partial \phi}{\partial x}$$

essent:

$J$ : Flux difusiu, el qual defineix la quantitat de substància per unitat d'àrea i temps

$$\left[ \frac{\text{mol}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}} \right]$$

$D$ : Coeficient de difusivitat (relatiu a la substància que s'estigui estudiant)  $\left[ \frac{\text{m}^2}{\text{s}} \right]$

$\phi$ : Concentració de substància per unitat de volum (es considera mescla ideal)  $\left[ \frac{\text{mol}}{\text{m}^3} \right]$

$x$ : Posició on es produeix la difusió per l'eix X [m]

El codi CFD del *software* realitza el càlcul de la difusió de Fick i incorpora el resultat per al càlcul del *Source Term S*, el qual s'afegeix a les equacions de Navier Stokes per al càlcul de la caiguda de pressió, tenint d'aquesta manera en consideració la difusió de caràcter laminar generada per un medi porós.

Pel que fa a la 2<sup>a</sup> Llei de Fick, aquesta s'utilitza per a la predicció de la variació de la concentració produïda per la mateixa difusió durant el temps. Tanmateix, ja que la metodologia d'ús dels sensors de paper comprèn una lectura del guix de difusió i pH pràcticament immediata, aquesta no es contempla per al present estudi.

Per la resolució de la Llei de difusió de Fick, el codi CFD d'Ansys necessita el valor del paràmetre de difusivitat  $D$  per a la seva resolució.

Al llibre *Laboratory methods in microfluidics* de (Giri, 2017) es dona un valor genèric aproximat de la constant de difusió  $D$  per colorant alimentari, el qual és de  $2 \cdot 10^{-10} \left[ \frac{\text{m}^2}{\text{s}} \right]$ . Tanmateix, el codi CFD d'Ansys *Fluent* requereix la inserció de la constant en  $\frac{\text{Kg}}{\text{m} \cdot \text{s}}$ , pel que es requereix multiplicar el valor anterior per la densitat del fluid de simulació, en aquest cas aigua.

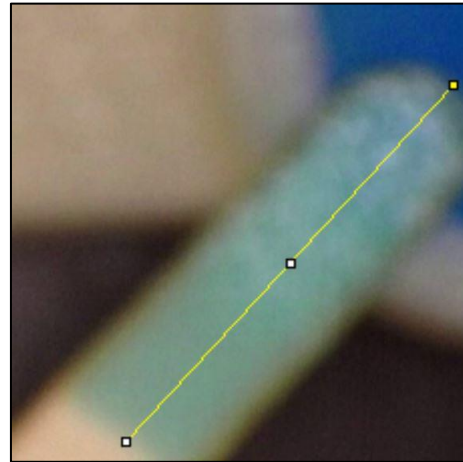
Aproximant la densitat de l'aigua  $\rho_{\text{aigua}} = 997 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}$  obtenim un valor de la constant de difusió  $D$  de  $D = 1,99 \cdot 10^{-7} \frac{\text{Kg}}{\text{m} \cdot \text{s}}$ . D'acord amb l'article de (Du Plessis & Woudberg, 2009), degut al caràcter porós del substrat utilitzat, la constant de difusió es veu afectada per la porositat ( $\varepsilon$ ) i la tortuositat ( $T$ ) del material porós, motiu pel qual és necessària la multiplicació de la constant  $D$  per la porositat del substrat de paper per tal que el valor inserit tingui sentit físic vers la simulació que es desitja realitzar. El valor de la porositat ( $\varepsilon = 0,6467$ ) es calcula a l'apartat següent del present document.

Pel motiu anterior, el valor final inserit al codi CFD és:  $D_{\text{porus}} = 1,29 \cdot 10^{-7} \cdot 0,6467 = 1,29 \cdot 10^{-7} \frac{\text{Kg}}{\text{m} \cdot \text{s}}$ .

## 8. Obtenció dels coeficients de simulació.

A partir de la gravació de les proves realitzades s'ha pogut calcular la velocitat del front de flux fent ús dels programaris *DinoCapture* i *ImageJ*, mesurant el moviment del reactiu (posició del front respecte l'extrem dels conductes d'entrada) al llarg de la superfície del conducte d'entrada, tal com es mostra a la il·lustració 29.

A l'hora de mesurar les distàncies pertinents, s'ha decidit utilitzar *DinoLite* com a pas intermediari, ja que s'ha preferit realitzar les mesures amb píxels a causa de la major precisió que aquesta unitat atorga. S'ha aprofitat el software associat per poder realitzar la conversió de píxels a mm, ja que hem pogut mesurar l'amplada dels *inlets* en diferents dispositius i fer-ne la mitja, la qual ha estat d'aproximadament **a = 2mm** (en l'operació de tall làser es cremen 0,5mm dels 2,5 mm amb què es dibuixen els sensors a *SolidWorks*).



Il·lustració 29: Mesura de la posició del front de flux amb *ImageJ* – Font: Autor

Al tractar-se d'un software associat al microscopi utilitzat, *DinoLite* reconeix automàticament els augments amb què s'ha gravat/fotografiat l'experiment, de manera que, al mesurar una distància, el programa la dona directament en unitats de longitud i no en píxels degut a que realitza la conversió de manera automàtica. Així doncs, s'ha mesurat l'amplada dels conductes d'entrada, primerament amb *DinoLite* i posteriorment amb *ImageJ*, obtenint-se una mitjana del valor de 123 px, pel que podem basar-nos en una conversió de  $\frac{123 \text{ px}}{2 \text{ mm}} = 67.5 \frac{\text{px}}{\text{mm}}$ .

A partir del factor de conversió anterior, s'han anat realitzant les mesures en píxels de la progressió del front del flux al llarg dels conductes d'entrada dels dispositius de mesura, i després s'ha usat la conversió trobada per tal d'obtenir les diferents posicions del front en els diferents instants de temps en mm. De manera indirecta, també podem conèixer la velocitat que ha seguit el fluid al llarg dels *inlets*, necessària per al càlcul de la caiguda de pressió a través de l'equació de Darcy, ja que sabem la posició del front a cada instant de la prova.

Si ens centrem ara en la caiguda de pressió  $\nabla p$  que pateix el fluid al llarg del seu recorregut a través dels conductes d'entrada, aquesta s'obté a partir de l'equació de Darcy, la qual s'ha presentat a l'equació 11 de l'apartat anterior amb les simplificacions intrínseques al nostre sistema:

$$\frac{dP}{dx} = \frac{\mu}{K} * U_x$$

Per al seu càlcul és necessari conèixer 3 variables: velocitat del front de flux (**U**), viscositat dinàmica del fluid (**μ**) i permeabilitat (**K**) de la superfície porosa.

Pel que fa a la velocitat del front del flux, aquesta l'obtenim, com s'esmenta anteriorment, a partir de l'avanç del fluid ( $\Delta x$ ) a cada segon (vídeos gravats a 1 fps per identificar de manera clara els intervals de temps). La definició física de la velocitat seria (per la direcció X del flux):



$$U_x = \frac{\Delta x}{\Delta t}$$

*Equació 13: Velocitat del front del flux al llarg de l'eix X de difusió*

essent:

$U_x$ : velocitat del front del flux en la direcció del moviment del fluid (considerem eix X)  $\left[\frac{m}{s}\right]$

$\Delta x$ : increment que pateix la posició del front del flux en la direcció del moviment del fluid  $[m]$

$\Delta t$ : increment de temps associat al moviment del fluid al llarg de la direcció del seu moviment (a l'estudi 1 s degut a la gravació de les proves a 1 fps)  $[s]$

La viscositat dinàmica del fluid és un paràmetre estandarditzat consultable. Per aigua, utilitzem la taula mostrada a la il·lustració 30, la qual estima el paràmetre (a 20 °C) en: 0,001003  $[Pa \cdot s]$  ó  $\left[\frac{Kg}{m \cdot s}\right]$ .

Temperatura °C	Viscosidad dinámica kg / (m·s)	Temperatura °C	Viscosidad dinámica kg / (m·s)	Temperatura °C	Viscosidad dinámica kg / (m·s)
0	0,001792	34	0,000734	68	0,000416
1	0,001731	35	0,000720	69	0,000410
2	0,001674	36	0,000705	70	0,000404
3	0,001620	37	0,000692	71	0,000399
4	0,001569	38	0,000678	72	0,000394
5	0,001520	39	0,000666	73	0,000388
6	0,001473	40	0,000653	74	0,000383
7	0,001429	41	0,000641	75	0,000378
8	0,001386	42	0,000629	76	0,000373
9	0,001346	43	0,000618	77	0,000369
10	0,001308	44	0,000607	78	0,000364
11	0,001271	45	0,000596	79	0,000359
12	0,001236	46	0,000586	80	0,000355
13	0,001202	47	0,000576	81	0,000351
14	0,001170	48	0,000566	82	0,000346
15	0,001139	49	0,000556	83	0,000342
16	0,001109	50	0,000547	84	0,000338
17	0,001081	51	0,000538	85	0,000334
18	0,001054	52	0,000529	86	0,000330
19	0,001028	53	0,000521	87	0,000326
20	0,001003	54	0,000512	88	0,000322
21	0,000979	55	0,000504	89	0,000319
22	0,000955	56	0,000496	90	0,000315
23	0,000933	57	0,000489	91	0,000311
24	0,000911	58	0,000481	92	0,000308
25	0,000891	59	0,000474	93	0,000304
26	0,000871	60	0,000467	94	0,000301
27	0,000852	61	0,000460	95	0,000298
28	0,000833	62	0,000453	96	0,000295
29	0,000815	63	0,000447	97	0,000291
30	0,000798	64	0,000440	98	0,000288
31	0,000781	65	0,000434	99	0,000285
32	0,000765	66	0,000428	100	0,000282
33	0,000749	67	0,000422		

*Il·lustració 30: Taula amb els diferents valors de la viscositat dinàmica de l'aigua en funció de la seva temperatura. Destacada en vermell la viscositat dinàmica de l'aigua a 20 °C – Font: [www.vaxasurface.com](http://www.vaxasurface.com)*

Considerant ara l'equació de Darcy per al càlcul de la permeabilitat del medi porós (necessària per a la resolució del codi CFD), tenim:

$$K = \frac{\mu * Q * L}{A * \nabla p}$$

*Equació 14: Equació de Darcy per medis porosos a partir del cabal volumètric del fluid*

essent:

$K$ : permeabilitat del medi porós  $[m^2]$

$\mu$ : viscositat dinàmica del fluid  $[Pa \cdot s]$  ó  $\left[\frac{Kg}{m \cdot s}\right]$

$Q$ : cabal volumètric de fluid  $\left[\frac{m^3}{s}\right]$

$L$ : gruix del cos porós  $[m]$

$A$ : àrea de la superfície porosa  $[m^2]$

$\nabla p$ : caiguda de pressió que pateix el fluid al llarg del cos porós  $[Pa]$

L'inconvenient per al nostre estudi està en el fet que el cabal volumètric no és controlat, degut a la no-presència d'un sistema de bombeig amb el qual es podria mesurar més

acuradament. Per tant, tot i que coneixem la quantitat de fluid abocat als dipòsits, no podem mesurar de manera precisa el cabal volumètric al llarg de la superfície del sensor.

Com a model de càlcul per l'obtenció de la permeabilitat d'un medi porós davant aigua, es sol aplicar l'aproximació de Kozeny-Carman, també coneguda com a teoria del radi hidràulic degut a la relació que estableix entre permeabilitat i l'estructura porosa dels materials (Nishiyama & Yokoyama, 2017). La teoria de Kozeny-Carman utilitza la ràtio de volum total de porus amb el total d'àrea de superfície molla, motiu pel qual és un dels models més apropiats a l'hora de realitzar estudis amb materials porosos, basant-se en la capil·laritat dels materials per a la predicció del comportament permeable d'aquests. A més, es tracta d'un model que mostra una correcta regressió per materials de porositat mitja, com és el cas del nostre estudi (més endavant es realitza el càlcul de la porositat del paper Whatman)

Tanmateix, alguns estudis han demostrat certs aspectes de l'equació original de Kozeny-Carman amb els quals aquesta no presenta correlació amb l'experimentació realitzada (Yazdchi et al., 2011), essent l'equació inconsistent en el càlcul de la permeabilitat transversal.

La Llei de Darcy Forchheimer és àmpliament utilitzada per fluxos unidireccionals continus a través de medis porosos, la qual presenta la proporcionalitat existent entre la velocitat del flux respecte de la pèrdua de càrrega que pateix el mateix flux al llarg del medi porós.

Es presenta la llei de Darcy-Forchheimer<sup>4</sup> aïllant la velocitat superficial, aplicada a medis porosos:

$$\vec{U}_{sup} = -\frac{K}{\mu} * \nabla p$$

*Equació 15: Llei de Darcy Forchheimer, aplicada per medis porosos*

essent:

$\vec{U}_{sup}$  : velocitat superficial  $\left[\frac{m}{s}\right]$

$K$  : permeabilitat del medi porós  $[m^2]$

$\mu$  : viscositat dinàmica del fluid  $\left[\frac{Kg}{m*s}\right]$

$\nabla p$  : pèrdua de càrrega generada pel material porós  $[Pa]$

La permeabilitat del material depèn, com es menciona amb anterioritat, de diferents paràmetres geomètrics de les fibres, com ara: aglomeració de les fibres, connexió entre les vores de les fibres, (no)homogeneïtat de les fibres, microestructura i orientació de les fibres i, sobretot, la **porositat** del medi.

---

<sup>4</sup> Es tracta de la mateixa equació (11) presentada anteriorment, però Forchheimer contempla la porositat del material al multiplicar la velocitat per la porositat del medi.  $\vec{U}_{sup} = U * \epsilon$

L'equació de Kozeny-Carman utilitza el diàmetre hidràulic ( $D_h$ ) expressat en funció de la porositat i la superfície específica porosa:

$$D_h = \frac{4 * \varepsilon * V}{S_v} = \frac{4 * \varepsilon}{(1 - \varepsilon) * a_v} = \frac{\varepsilon * d}{(1 - \varepsilon)}$$

*Equació 16: Expressió del diàmetre hidràulic aplicada per l'equació de Kozeny-Carman*

essent:

$D_h^5$  : diàmetre hidràulic del material porós [m]

$\varepsilon$  : porositat del medi porós [Adim.]

$V$  : volum total de material porós [ $m^3$ ]

$S_v$  : superfície molla del medi porós [ $m^2$ ]

$a_v^6$  : superfície específica (depèn de la secció) [ $m^{-1}$ ]

$d$  : diàmetre de les fibres del material porós [m]

L'equació de Poiseuille, utilitzada per determinar el flux laminar estacionari d'un líquid viscos (a través d'un tub circular) es pot aproximar al nostre sistema.

L'equació de Poiseuille expressada a partir del diàmetre hidràulic es mostra a continuació:

$$\langle \bar{u} \rangle = -\frac{(D_h)^2}{32 * \mu} * \nabla p$$

*Equació 17: Equació de Poiseuille expressada en funció del diàmetre hidràulic*

essent:

$\bar{u}$  : velocitat del front de flux [ $\frac{m}{s}$ ]

$D_h$  : diàmetre hidràulic del material porós [m]

$\mu$  : viscositat dinàmica del fluid [ $\frac{Kg}{m*s}$ ]

$\nabla p$  : pèrdua de càrrega generada pel material porós [Pa]

---

<sup>5</sup> Constant sovintment usada en el camp de la hidràulica. Estableix la relació entre l'àrea total d'un conducte respecte del perímetre de la secció que queda moll al passar-hi un cert fluid.

<sup>6</sup> Estableix la relació:  $a_v = \frac{\text{superfície molla}}{\text{volum total}}$

Per tal d'arribar a l'equació de Kozeny-Carman “modificada”, substituïm el diàmetre hidràulic (16) dins l'equació de Poiseuille (17), obtenint:

$$\langle \bar{u} \rangle = - \frac{\left( \frac{\varepsilon * d}{(1 - \varepsilon)} \right)^2}{32 * \mu} * \nabla p = - \frac{\frac{\varepsilon^2 * d^2}{(1 - \varepsilon)^2}}{32 * \mu} * \nabla p = \frac{\varepsilon^2 * d^2}{32 * \mu * (1 - \varepsilon)^2} * \nabla p$$

*Equació 18: Equació de Poiseuille, substituint el diàmetre hidràulic presentat anteriorment*

Combinant l'equació de Poiseuille (17) amb la llei de Darcy Forchheimer (15), s'arriba a l'expressió de Kozeny-Carman modificada, presentada a l'estudi de (Yazdchi et al., 2011), utilitzada en el present estudi per la determinació de la permeabilitat del substrat de paper.

Es presenta a continuació l'equació de Kozeny-Carman modificada:

$$\frac{K}{d^2} = \frac{\varepsilon^3}{\psi_{CK} * (1 - \varepsilon)^2}$$

*Equació 19: Equació de Kozeny-Carman modificada – Font: (Yazdchi et al., 2011)*

essent:

$K$  : permeabilitat del material porós [ $m^2$ ]

$d$  : diàmetre de les fibres del material porós [ $m$ ]

$\varepsilon$  : porositat del material porós [Adim.]

$\psi_{CK}$ : factor de Carman-Kozeny [Adim.]

Destacar que s'ha de tindre en compte que la velocitat de la llei de Darcy Forchheimer (15) és la velocitat superficial, motiu pel qual la porositat  $\varepsilon$  té exponent al cub.

La constant  $\psi_{CK}$  es determina a partir de factors de forma i desviació del flux a través de les fibres (tortuositat<sup>7</sup>), prenent un valor de  $\psi_{CK} = 180$  per esferes apilades aleatòriament (“llits apilats”). Es tracta d'un valor genèric utilitzat per medis porosos, tot i que el valor pot oscil·lar entre [80 ↔ 320].

Inicialment, Carman defineix el factor CK a partir d'un factor de forma i la tortuositat del material porós:

$$\psi_{CK} = \Phi * (T)^2$$

*Equació 20: Equació pel factor de forma CK*

essent:

$\psi_{CK}$ : factor de Carman-Kozeny [Adim]

$\Phi$  : factor geomètric del porus [Adim]

<sup>7</sup> La tortuositat ( $T$ ) és la constant que defineix la relació entre la longitud de fibra i la distància recorreguda pel flux a través de les mateixes

$T$  ó  $\left(\frac{L_E}{L}\right)$ : tortuositat del material porós. [Adim]

Si substituïm el factor CK dins l'equació (19), s'obté:

$$\frac{K}{d^2} = \frac{\varepsilon^3}{\Phi * \left(\frac{L_E}{L}\right)^2 * (1 - \varepsilon)^2}$$

*Equació 21: Equació de Kozeny-Carman modificada, aplicant el factor geomètric i la tortuositat del substrat*

essent:

$K$  : permeabilitat del material porós [ $m^2$ ]

$d$  : diàmetre de les fibres del material porós [m]

$\varepsilon$  : porositat del material *Whatman* [Adim]

$\Phi$  : factor de geometria del porus [Adim]

$L_E^8$ : longitud del recorregut del flux al llarg del material porós [m]

$L^9$  : longitud de les fibres del material porós [m]

A l'equació original de CK, s'assumeix la tortuositat  $T = \frac{L_E}{L} = \sqrt{2}$  i  $\Phi = 90$ , obtenint un factor CK de  $\psi_{CK} = 180$  mencionat anteriorment, entenent la tortuositat com una variable constant.

Tanmateix, la tortuositat, igual que la porositat, és una variable que depèn de l'organització interna de les fibres i de la permeabilitat, essent un factor altament influent en l'obtenció del factor CK, com s'observa a l'equació 20 anterior.

A partir de l'estudi de (Yazdchi et al., 2011) s'arriba a la conclusió de què la tortuositat no és una variable constant, sinó que segueix un comportament lineal en funció de la porositat del medi. A més, es determina que  $T < \sqrt{2}$  per fibres unidireccionals distribuïdes aleatòriament en la gran majoria de casos (exceptuant sistemes amb porositats molt baixes).

A l'article citat s'arriba a un valor del factor de forma del porus de  $\Phi \sim 140$ , per porositats en el rang  $[0,4 < \varepsilon < 0,9]$ , en el que es troba la porositat del paper normalitzat utilitzat en el nostre estudi.

Així doncs, per al present projecte es decideix utilitzar  $\Phi = 140$  en l'obtenció de la permeabilitat del material porós a l'equació modificada de Kozeny-Carman (21).

<sup>8</sup> Per al càlcul, es considera  $L_E = L_{inlet} + L_{zona-difusió} \approx 26,72 \text{ mm}$

<sup>9</sup> A través de dades cedides pel Dept. Enginyeria Paperera de l'ESEIAAT, s'obté pel cotó una longitud de fibra de  $L = 0,83 \text{ mm}$

Aïllant la permeabilitat  $K$  de l'equació 21 obtenim finalment:

$$K = \frac{\varepsilon^3 * d^2}{\Phi * \left(\frac{L_E}{L}\right)^2 * (1 - \varepsilon)^2}$$

*Equació 22: Equació de Kozeny-Carman modificada, amb el paràmetre característic del substrat  $K$  aïllat*

Per al càlcul de la porositat del paper *Whatman N° 05* emprat en l'estudi, s'aplica la següent expressió (Tanpichai et al., 2019), adequada per materials cel·lulòsics:

$$\varepsilon = \left[ 1 - \left( \frac{\rho m}{\rho_{cellulose}} \right) \right] * 100$$

*Equació 23: Expressió per al càlcul de la porositat per medis porosos – Font: (Tanpichai et al., 2019)*

essent:

$\varepsilon$ : porositat del medi porós, en percentatge

$\rho m^{10}$ : densitat aparent del paper normalitzat  $\left[ \frac{Kg}{m^3} \right]$

$\rho_{cellulose}^{11}$ : densitat de la cel·lulosa  $\left[ \frac{Kg}{m^3} \right]$

Substituint les variables obtenim un valor de porositat de:

$$\varepsilon = \left[ 1 - \left( \frac{0,53}{1,5} \right) \right] * 100 = 64,67 \%$$

Tanmateix, a l'hora de substituir el valor de la porositat a l'equació 22, es considera com a valor de porositat  $\varepsilon = 0,6467$ , per tal que l'equació tingui sentit físic.

Substituint els valors dels paràmetres a l'equació de Kozeny-Carman modificada s'obté un valor de permeabilitat de:

$$K = \frac{0,6467^3 * 0,0000196^2}{140 * \left( \frac{0,02672}{0,00083} \right)^2 * (1 - 0,6467)^2} = 5,74 * 10^{-15} m^2$$

Un cop trobat el valor de la permeabilitat del paper *Whatman K*, i sabent el valor de la viscositat dinàmica del fluid així com la velocitat seguida pel front de flux al llarg del moviment del fluid, podem substituir els valors a l'equació 11 per al càlcul de la caiguda de pressió a cada instant de les proves experimentals.

<sup>10</sup> Representa el rati entre massa i volum del paper. A l'estudi de (Casals-Terré et al., 2019) s'obté  $\rho m = 0,53 \frac{g}{cm^3}$

<sup>11</sup> De manera general es pot considerar, per estudis de medis porosos,  $\rho_{cellulose} = 1,5 \frac{g}{cm^3}$ .



El coeficient associat al terme quadràtic  $C_2$  per al càlcul de  $\nabla p$  fa referència a la *Inertial Resistance*, el qual s'ha d'introduir directament al codi CFD de l'Ansys, dividint-lo pel gruix del paper. Aquest coeficient s'aconsegueix a partir de la regressió lineal polinòmica de 2<sup>n</sup> ordre obtinguda a partir de les dades experimentals de  $\nabla p$ .

Tanmateix, per sistemes on les forces viscoses siguin dominants, **podem menysprear el coeficient associat a les resistències inercials** (Fazin et al., 2019). Així doncs, per al nostre sistema menyspreem el terme  $C_2$ , introduint al codi CFD un valor de 0 per ambdues direccions (sistema isotròpic), tal com s'ha mencionat a l'apartat anterior.

Pel que fa al coeficient associat al terme lineal  $C_1$ , aquest guarda relació amb la viscositat dinàmica del fluid i amb la permeabilitat del paper, tal com mostra l'equació 12.

*Ansys Fluent* requereix la inversa de la permeabilitat per al correcte càlcul iteratiu. Així doncs, el valor inserit al codi CFD ha estat de  $\frac{1}{K} = \frac{1}{5,74 \cdot 10^{-15}} = 1,74 \cdot 10^{14} \text{ m}^2$  per ambdós eixos de difusió.

En primera instància, pot semblar que en utilitzar l'equació 12, substituint el valor de  $C_1$  obtingut per mitjà de la corba de tendència dels punts de la caiguda de pressió haurem d'obtenir el valor de permeabilitat utilitzat per al propi càlcul de pèrdua de càrrega. Tanmateix, s'ha de recordar que el coeficient  $C_1$  s'obté a partir de la corba de tendència realitzada a partir dels valors de caiguda de pressió registrats a les proves experimentals.

Les corbes obtingudes, les quals es mostren a l'apartat 9.2 d'aquest document, s'ajusten als valors donats de  $\nabla p$  amb una regressió òptima de  $R^2 > 0,95$ , però evidentment tenim un marge d'error a causa de la impossibilitat d'obtenir una regressió "ideal" de  $R^2 = 1$  a les proves experimentals amb les diferents variables secundàries d'influència presents en els experiments.

Per aquest motiu, si usem el valor de  $C_1$  obtingut a través de l'equació de la corba per tal de trobar el valor de permeabilitat a l'equació 12, obtindrem un valor diferent de l'usat per al càlcul de la pèrdua de càrrega, ja que les corbes de tendència graficades ens ajuden a conèixer el comportament de la pèrdua de càrrega al llarg del sensor de manera aproximada, però no descriuen el comportament exacte que tindran els dispositius de mesura a la realitat.

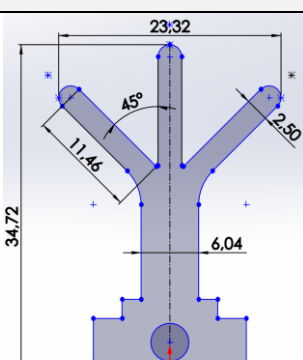
Així doncs, el terme lineal de la caiguda de pressió, referent a les forces viscoses presents en el moviment laminar del fluid a través del substrat de paper, s'introdueix al codi CFD per mitjà de la inversa de la permeabilitat, tot i que també es calcula el valor exacte del coeficient lineal  $C_1$  ja que es grafiquen les corbes de tendència a partir de les dades de caiguda de pressió obtingudes de les proves experimentals realitzades per tal d'aprofundir en l'anàlisi del comportament dels sensors de paper davant el fenomen microfluídic.

Per altra banda, com que s'obtenen les corbes de tendència, també obtenim el valor del coeficient  $C_2$  associat a les forces inercials presents en el moviment del fluid, encara que aquest no es tingui en compte dins el codi de resolució CFD a causa del caràcter laminar de la difusió a través del substrat.

## 9. Anàlisi dels resultats

### 9.1 Simulacions amb Ansys Fluent

Després de realitzar diverses modificacions del mecanisme de sincronització, el qual és un element clau a l'hora d'obtenir resultats òptims a les proves de fluid, s'ha corroborat experimentalment el bon funcionament dels sensors v7 amb el mecanisme de sincronització 6S\_DEVICE\_H01\_6. Es pot considerar doncs el sensor v7 com la versió definitiva de dispositiu de mesura de pH. Es presenten a mode de taula les dimensions del sensor v7 amb conductes laterals inclinats a 45°:

Sensor v7 – Conductes laterals a 45°			
Alçada màxima (mm)	34,72		
Amplada màxima (mm)	23,32		
Amplada zona difusió (mm)	6,04		
Amplada dels <i>inlets</i> (mm)	2,50		
Longitud dels <i>inlets</i> (mm)	11,46		
Angle entre <i>inlets</i> $\theta$ (°)	45		

Taula 10: Dimensions generals del sensor v7 amb conductes laterals inclinats 45°, el qual ha mostrat repetibilitat en els experiments realitzats al laboratori – Font: Autor

Abans del seu tallat làser, les diferents versions del sensor v7 han estat simulades, comprovant-ne el seu comportament davant la difusió de fluid a través dels seus *inlets*. Els resultats obtinguts han resultat favorables per graus d'inclinació  $\leq 45^\circ$ , semblant-se en gran mesura als obtinguts posteriorment a la realitat.

Es tracta d'un dispositiu amb l'extrem de les seves aletes arrodonides, la qual cosa ens assegura el contacte entre la superfície del substrat i els reactius dels dipòsits. Pel sensor v7 amb 45° d'inclinació dels conductes laterals, s'utilitza el dipòsit 1 (45°), el qual s'havia imprès abans d'iniciar l'estudi, aprofitant d'aquesta manera la peça inicial. Després de comprovar el funcionament del sensor v7, se simulen variants del sensor amb angles d'inclinació menors per tal de comprovar-ne si hi ha alguna disposició amb la qual es puguin obtenir millors resultats.

També s'han simulat altres dissenys de sensor, com ara els sensors v2, tot i que a causa de la mala sincronització produïda en el contacte substrat-reactiu per culpa de la morfologia de l'extrem dels conductes d'entrada (explicat en major detall al següent apartat), es decideix aprofundir en les simulacions dels dispositius v7.

Tots els gràfics i diagrames obtinguts a partir del *software Ansys Fluent*, així com els gràfics obtinguts a partir de les dades de la difusió UDS es mostren al document **ANNEX III: PASSOS REALITZATS EN LES SIMULACIONS DELS SENSORS – RESULTATS OBTINGUTS**, conjuntament amb l'explicació dels diferents passos seguits en la configuració del codi de resolució CFD del *software* per dur a terme les simulacions

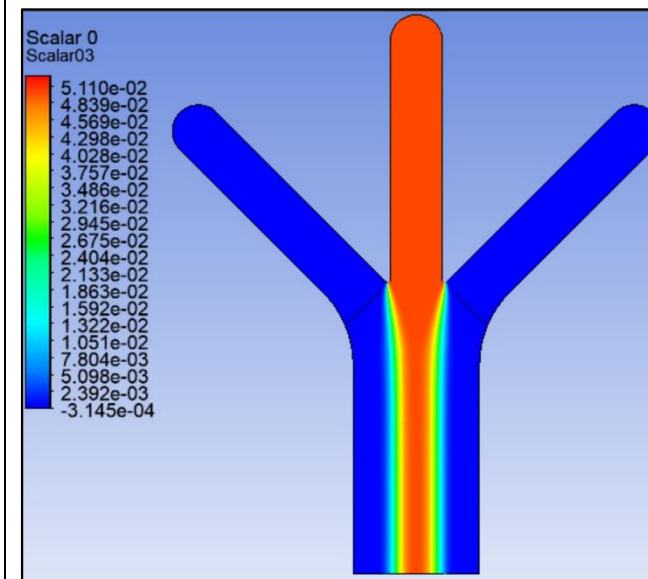
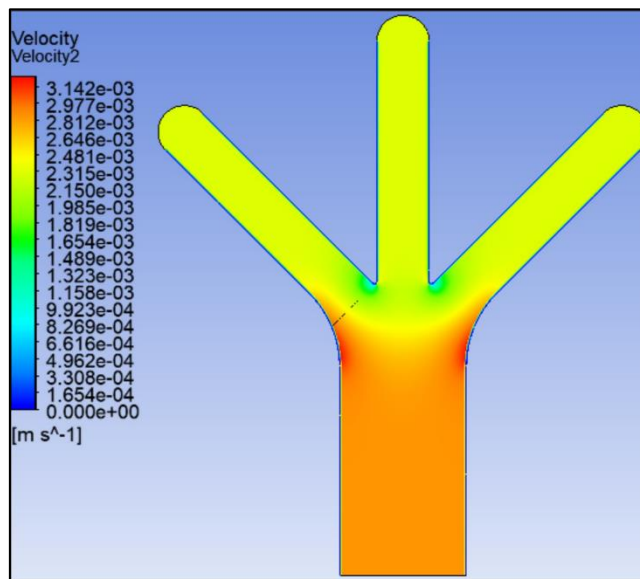
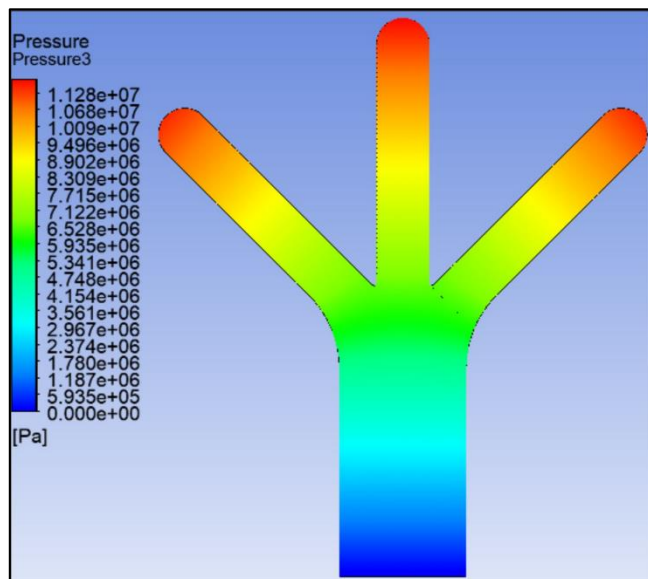
S'adjunta a la pàgina següent, a mode de taula, els gràfics definitius de les variables principals d'estudi: pressió, velocitat i UDS, obtinguts per mitjà d'Ansys Fluent per un sensor v7 a 45°, la qual ha estat la variant del sensor v7 amb la que més s'ha treballat a les proves experimentals:

GRÀFICS DEFINITIUS – SENSOR v7 AMB  $\theta = 45^\circ$ 

PRESSIÓ (Pa)

VELOCITAT (m/s)

UDS (mg/ml)

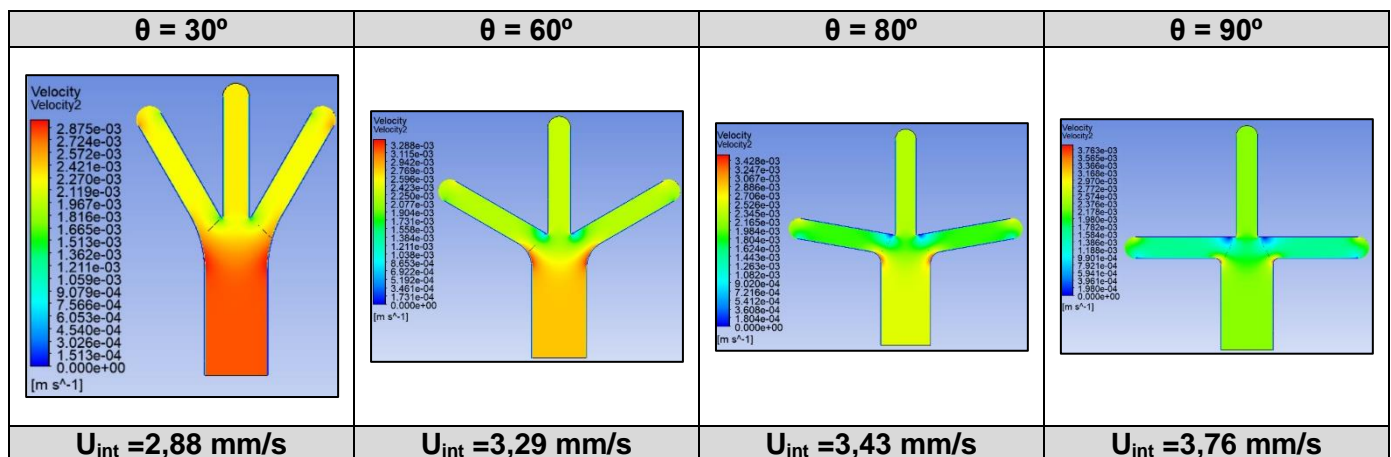


Taula 11: Gràfics definitius obtinguts pel sensor v7 amb inclinació de  $45^\circ$  dels conductes laterals vers el central de les 3 variables d'estudi principals: pressió, velocitat i UDS – Font: Autor

El substrat de paper genera una caiguda de pressió sobre el fluid de l'ordre de E+7 Pascals, pel que es comprova, a partir de les simulacions, com el *Whatman N°05* és un material capaç d'extreure una gran part de l'energia "continguda" en el moviment del fluid. A la taula 11 s'observa, per la pressió, les diferents "franges" de caiguda de pressió generades al llarg de la superfície del sensor, des de l'extrem dels conductes d'entrada fins abans d'arribar a la base de subjecció.

A l'entrada dels sensors es produeix la caiguda de pressió més elevada amb motiu de l'inici de la difusió a través la superfície del substrat. Per forces capil·lars, els reactius inicien la seva difusió a través de les fibres del substrat de paper, produint-se un gradient de concentració entre la zona d'elevada concentració molecular i la zona amb concentració molecular nul·la.

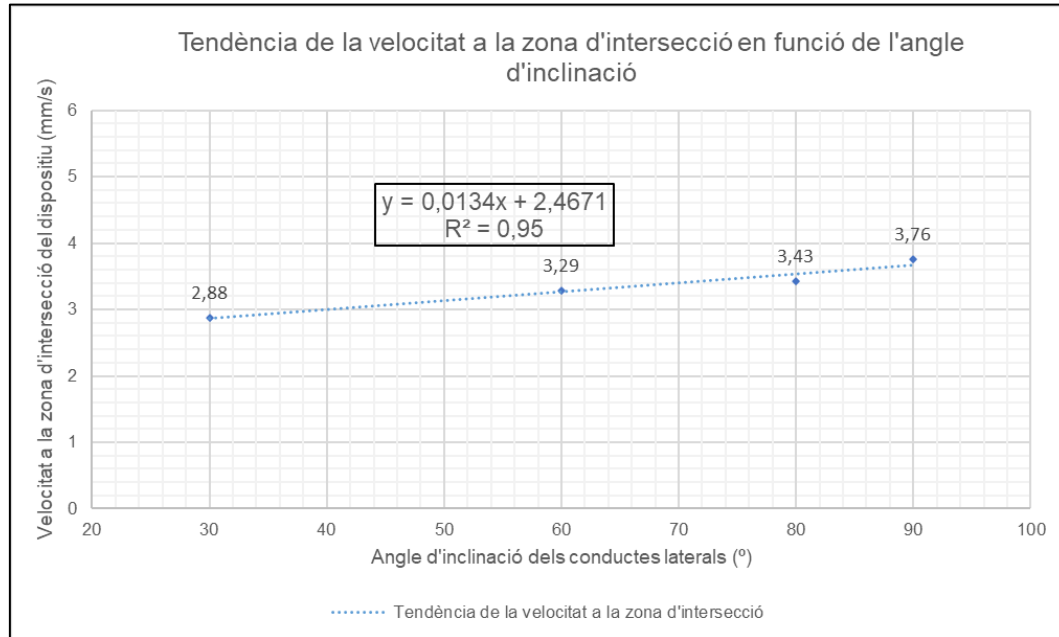
Pel que fa a la velocitat del front, s'observa com es tracta d'un sistema que destaca pel seu caràcter laminar, on la velocitat es manté constant al llarg de la superfície dels conductes d'entrada. En arribar el front de flux a la zona d'intersecció (frontera entre superfície dels conductes d'entrada i part central del substrat), es produeix un augment de la velocitat degut al canvi de secció de la superfície. A partir de les simulacions realitzades per diferents inclinacions del sensor v7 s'observa com l'augment de velocitat en traspasar la intersecció és proporcional a l'angle d'inclinació dels conductes laterals. El fet anterior es posa de manifest a la següent taula, on s'observa com, per angles d'inclinació de 30°, 60°, 80° i 90° respectivament, l'augment de velocitat que es produeix a la zona d'intersecció va en augment.<sup>12</sup>



Taula 12: Evolució de l'augment de velocitat que es produeix a la zona d'intersecció a mesura que augmenta l'angle d'inclinació dels conductes laterals – **Font:** Autor

<sup>12</sup> No s'ha de prestar atenció al diagrama de colors establert, sintó al valor de velocitat d'intersecció indicat, ja que la distinció de color realitzada per Ansys és considerant únicament un dispositiu sense comparar varis a l'hora

A través dels resultats obtinguts de les simulacions amb Ansys es realitza la regressió lineal de la velocitat d'intersecció en funció de la inclinació dels conductes laterals respecte del central, la qual es mostra a continuació:



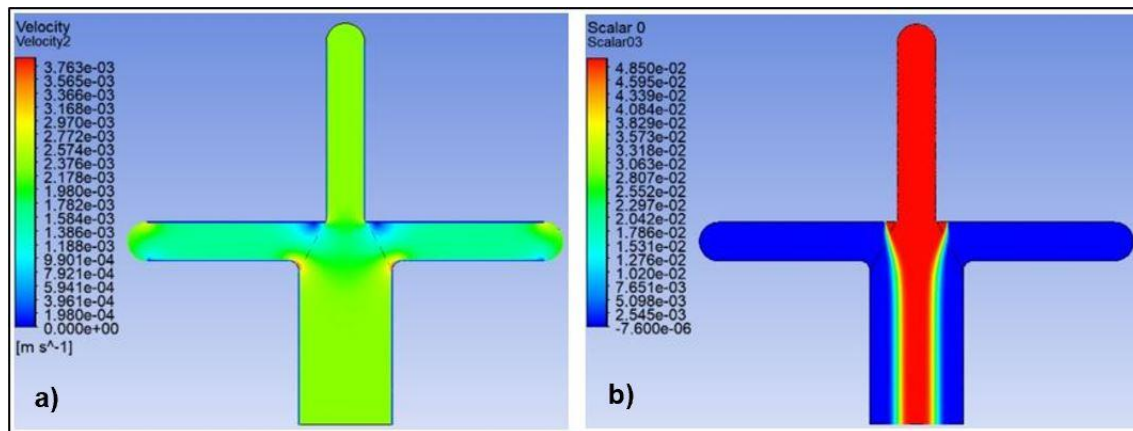
*Il·lustració 31: Línia de tendència de caràcter lineal graficada a partir dels valors de velocitat a la zona d'intersecció extrets de les simulacions d'Ansys Fluent - Font: Autor*

A través de la il·lustració anterior podem concloure com la velocitat augmenta seguint un pendent positiu, a través de la qual es demostra la relació proporcional existent entre la velocitat generada a la zona d'intersecció i l'angle d'inclinació dels conductes laterals amb una regressió òptima de  $R^2 = 0,95$ .

Per altra banda, s'aprecia un cert decreixement de la velocitat del front als vèrtexs entre els diferents *inlets*, visibles a la taula 12 anterior, tot i que no es pot considerar com una *dead-zone* per sensors amb angles d'inclinació baixos, ja que la velocitat no arriba a valors propers a 0, sense produir-se difusió del colorant central sobre la superfície dels *inlets* laterals.



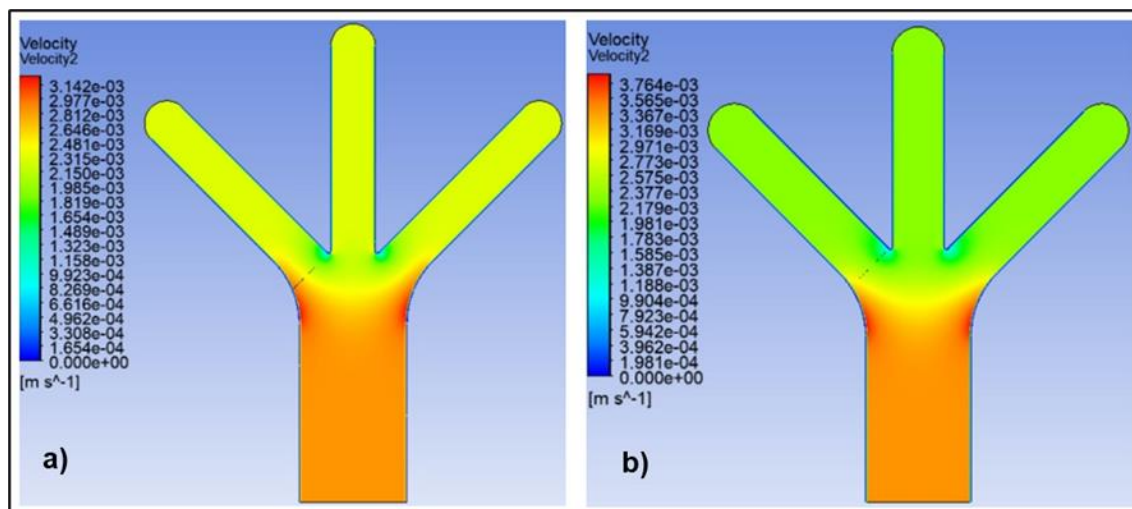
Aquest fet sí que es posa de manifest a la il·lustració 32, on observem com degut a l'angle màxim de  $90^\circ$  entre conductes, existeix una “zona morta” on la velocitat arriba a valors de 0 (a) i per tant es produeix la difusió del colorant central cap a la superfície dels conductes laterals (b).



Tanmateix, considerant el comportament del sensor v7 amb inclinació de  $45^\circ$ , utilitzat a les proves del laboratori, s'observa a la taula 11 anterior com es tracta d'un augment mínim de la velocitat, i en una distància mínima el flux es torna a estabilitzar, mantenint una velocitat constant al llarg de la zona central del dispositiu sense cap mena de turbulències a causa de la mida microscòpica del porus, de l'ordre de  $\mu\text{m}$  pel substrat utilitzat.

Succeeix el mateix amb angles  $\theta < 45^\circ$ , ja que degut al menor angle d'inclinació, menys abrupte és el canvi de secció a la zona d'intersecció entre conductes d'entrada i zona central del sensor, pel que l'augment de velocitat també es veu reduït.

Centrant-nos ara en l'amplada dels conductes d'entrada dels dispositius de mesura, s'ha comprovat com aquesta guarda una relació inversament proporcional amb la velocitat del front de flux, tal com es mostra a la il·lustració 32 següent:



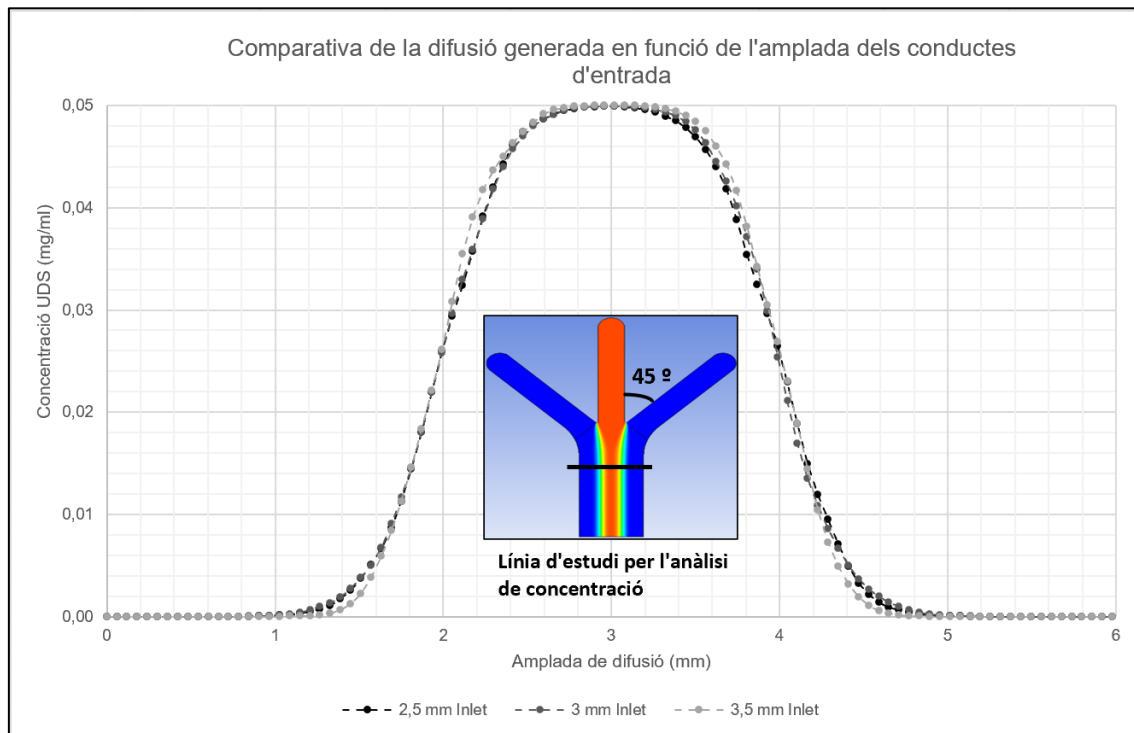


En ambdós casos tenim una velocitat constant al llarg dels conductes d'entrada de 3,14 i 3,76 mm/s respectivament, característic del moviment fluídric que es dona al llarg de la superfície del substrat, el qual és un material amb mida de porus de l'ordre de  $\mu\text{m}$  (règim laminar). Així doncs, s'aprecia la relació inversament proporcional comentada amb anterioritat, visible a través del diagrama de colors obtingut per mitjà d'*Ansys Fluent*.

El fet anterior es deu principalment a la major difusió que s'ha de produir al llarg de l'eix X per tal que el front avanci, ja que aquest ha de difondre's per un major nombre de fibres del substrat, tractant-se d'un sistema de difusió isotròpic. Tanmateix, s'observa com en ambdós casos, després de travessar la zona d'intersecció i produir-se l'augment de velocitat, s'aconsegueix establir el flux novament i continuar amb un règim fluídric laminar.

Considerant que es tracta de dos variants del mateix sensor v7 a  $45^\circ$ , podem concloure com un augment de 0,5 mm en l'amplada total dels conductes d'entrada no suposa una millora del comportament del dispositiu pel que fa a la difusió entre reactius generada a la seva zona central, motiu pel qual se centra l'estudi en la fabricació de dispositius amb amplades de conducte de  $a = 2,5$  mm. A més, a l'hora de considerar dispositius amb amplades de conductes superiors (4 – 5 mm), comportaria també un augment de l'amplada total de la zona central de difusió, obligant a realitzar modificacions del disseny del mecanisme de sincronització, així com la utilització d'una major quantitat de reactiu, el qual sol ser un producte de preu elevat.

Es demostra per mitjà de la il·lustració 34 la invariabilitat de l'amplada de difusió a la zona central del sensor (analitzada just després de la zona d'intersecció, un cop es torna a la laminaritat característica del moviment fluídric) tot i l'augment de l'amplada dels conductes d'entrada:



Il·lustració 34: Comparació de la concentració i amplada de la difusió generada a mesura que s'augmenta la secció dels conductes d'entrada, observant-se la invariabilitat de la concentració – Font: Autor

L'estudi de difusió de la concentració UDS s'ha realitzat a partir d'una línia, la qual creua horitzontalment la secció de la zona central del sensor, un cop la difusió es troba estabilitzada després que els reactius hagin creuat les zones d'intersecció pertinents, tal com es menciona amb anterioritat.

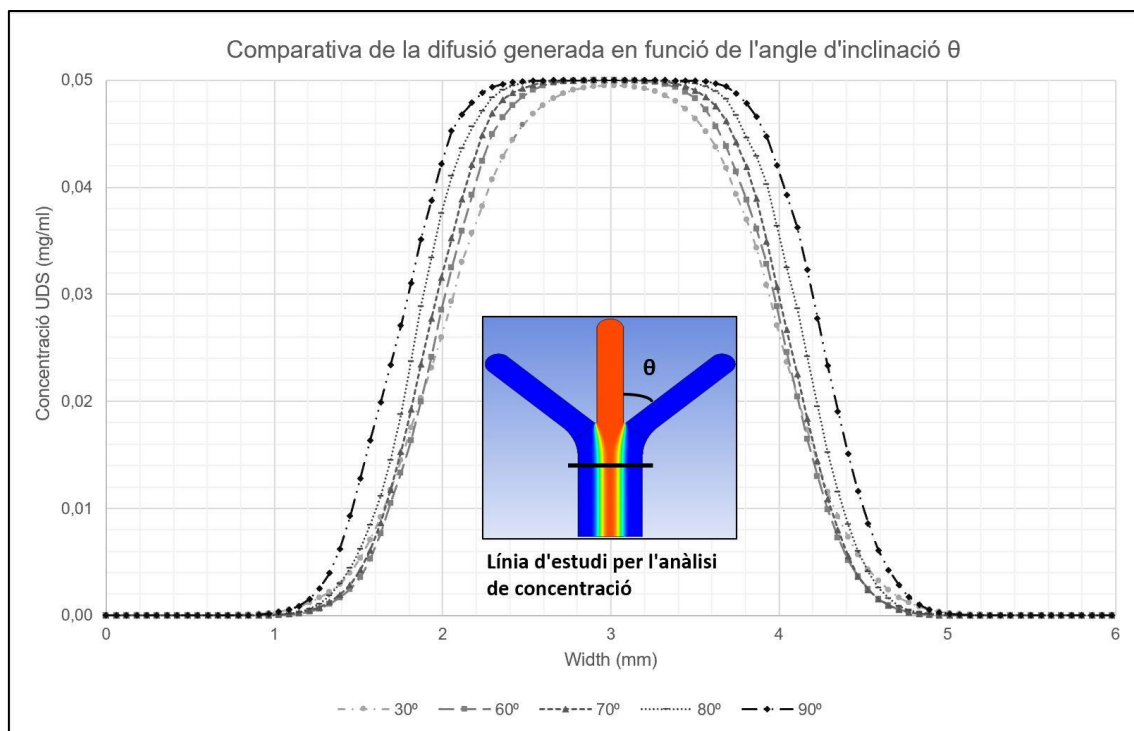
S'observa a la il·lustració 34 la “campana” generada per la concentració en funció de l'amplada dels conductes laterals pel dispositiu v7 a 45°, on les “rampes” que s'observen corresponen a la difusió dels reactius corresponents als conductes laterals vers el colorant que circula per l'*inlet* central. S'aconsegueix una amplada de difusió dels reactius laterals d'1,5 mm aproximadament a cada banda del substrat, ocupant el reactiu central 1 mm i establint una difusió simètrica entre els reactius.

Així doncs, no es pot establir cap relació (inversament)proporcional entre l'amplada dels conductes d'entrada i la difusió generada a la zona central del substrat, ja que les “campanes” de difusió mostrades a la il·lustració 34 pràcticament se superposen entre si.

Per altra banda, centrant-nos en la variabilitat de l'amplada de difusió en funció de l'angle d'inclinació dels conductes laterals, s'ha observat com la difusió guarda una relació inversament proporcional amb l'angle d'inclinació dels conductes laterals. A partir de les dades extretes dels gràfics de difusió de UDS generats amb *Ansys Fluent*, s'han superposat les “campanes” de difusió obtingudes per diferents angles  $\theta$  d'inclinació pel sensor v7, observant-se la relació mencionada anteriorment.

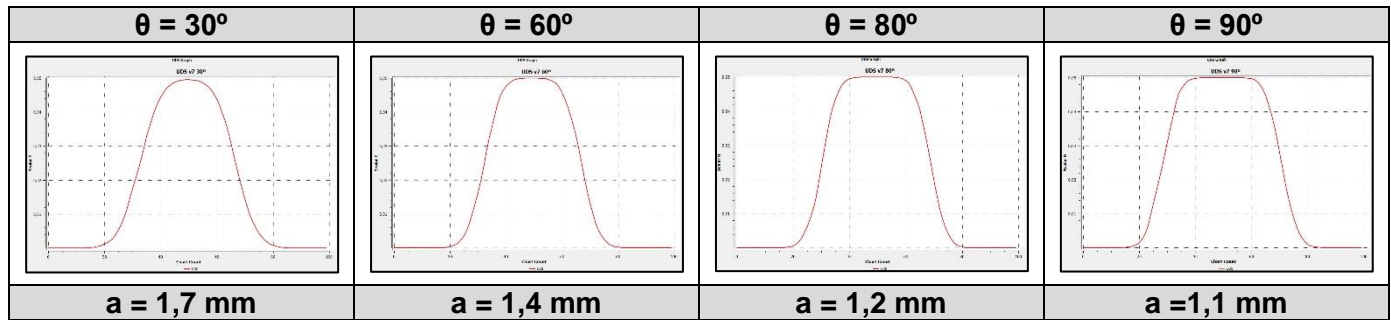
El fet anterior està directament relacionat amb la velocitat generada a la zona d'intersecció, la qual guarda una relació proporcional amb l'angle d'inclinació dels conductes laterals tal com s'ha evidenciat a la taula 12 anterior.

A la següent il·lustració es mostren les campanes de difusió generades per angles d'inclinació de 30°, 60°, 80° i 90° respectivament:



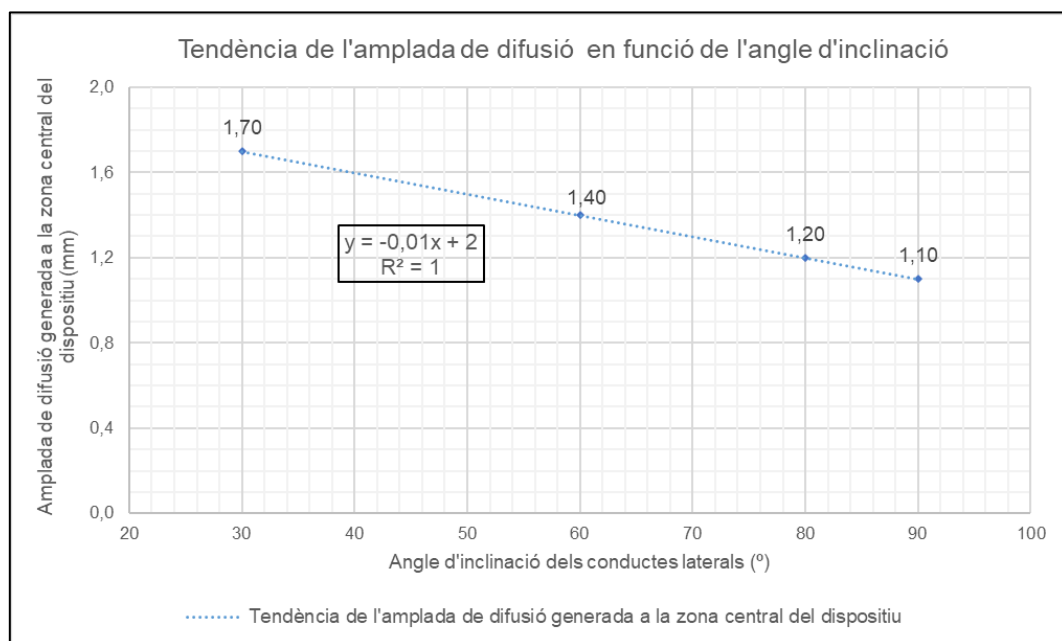
Il·lustració 35: Comparació de la concentració i amplada de difusió generada per diferents angles d'inclinació dels conductes laterals, observant-se la relació inversament proporcional existent entre els factors – Font: Autor

S'analitza a la taula següent l'amplada de difusió generada a la zona central del substrat pels mateixos angles d'inclinació anteriors:



Taula 13: Evolució de l'amplada de difusió adoptada a la zona central del substrat a mesura que augmenta l'angle d'inclinació dels conductes laterals – Font: Autor

Si es grafica la línia de tendència seguida per l'amplada de la difusió a la zona central del substrat, de la qual es presenten els valors a la taula anterior, s'obté el gràfic mostrat a la il·lustració 36:



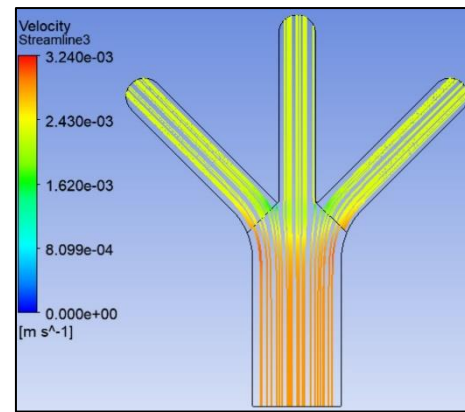
Il·lustració 36: Tendència seguida per l'amplada de difusió a la zona central del dispositiu de mesura en funció de l'angle d'inclinació dels conductes laterals d'entrada – Font: Autor

Pels interessos de l'estudi, es necessita disposar del pendent menys agressiu (de les "campanes" de difusió), ja que això es tradueix a la pràctica en una major amplada de difusió entre els reactius. A més, s'ha observat a partir dels resultats realitzats per les diferents inclinacions dels conductes laterals com, per angles baixos, en passar el flux de les superfícies dels conductes a la superfície central del dispositiu, l'augment de velocitat generat és menor o pràcticament nul, mentre que per angles  $\theta$  superiors, hi ha un major salt de velocitat en passar de la superfície de l'aleta (taula 12).

Les velocitats baixes a la zona d'intersecció afavoreixen una major difusió entre els reactius ja que en faciliten la difusió, mentre que les velocitats altes generen una difusió menys estable, tardant més temps en aconseguir un gruix de difusió constant a la zona central.

Finalment, pel que fa a la direcció del flux, s'ha comprovat com les direccions inserides al codi CFD han funcionat correctament i els reactius segueixen la direcció desitjada independentment de la inclinació dels conductes laterals, mostrat a la il·lustració 37 per un sensor v7 amb  $\theta = 45^\circ$ .

Destacar també la simetria mostrada pels diferents sensors, els quals independentment del disseny i de la variable de càlcul, mostren simetria a banda i banda de la seva superfície per les diferents variables de simulació.



*Il·lustració 37: Diagrama de les línies de flux seguides pel front, on s'indica la velocitat seguida per aquest – Font: Autor*

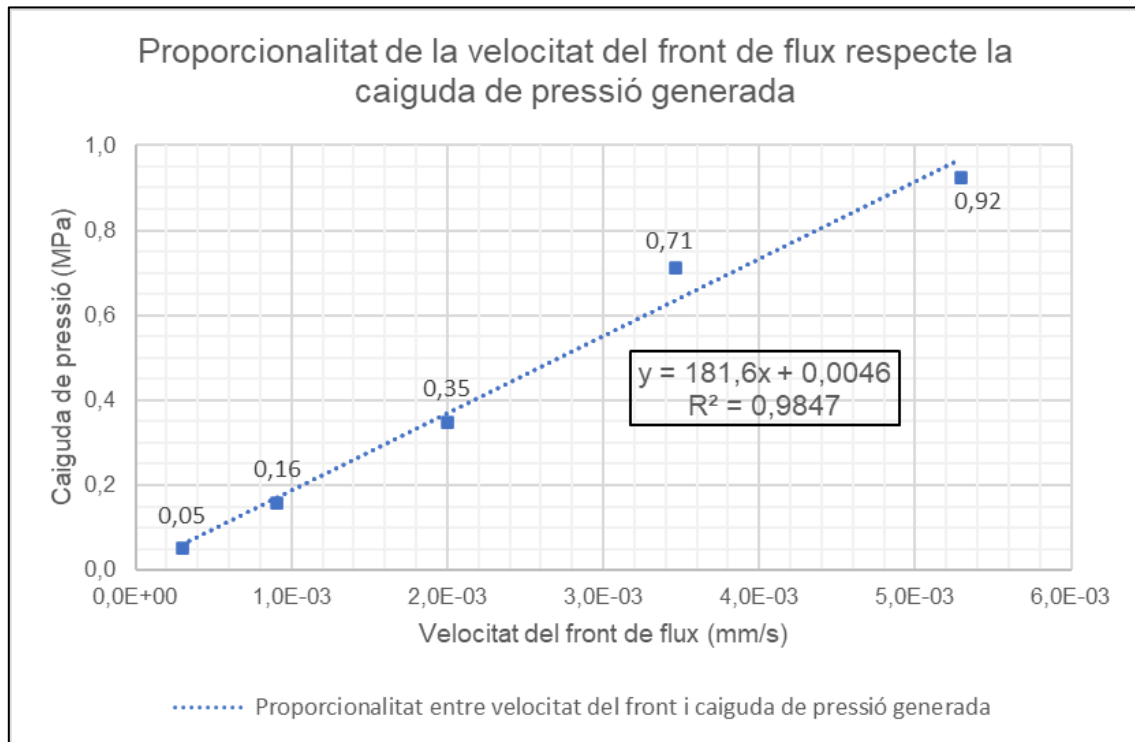
## 9.2 Comportament dels sensors de paper – Proves experimentals

A partir de la gravació dels experiments amb el microscopi *DinoLite* s'ha pogut enregistrar posteriorment la velocitat i posició del front del flux al llarg de la superfície del substrat. Conjuntament al valor de velocitat, s'ha utilitzat l'expressió de **Kozeny-Carman** presentada a l'article de (Yazdchi et al., 2011) per al corresponent càlcul de la permeabilitat. Finalment, s'ha utilitzat el valor de la viscositat dinàmica de l'aigua, conjuntament amb el valor de la permeabilitat i la velocitat del front de flux per tal de poder resoldre l'equació de **Darcy** per medis porosos i d'aquesta manera obtenir la caiguda de pressió generada pel substrat de paper.

Les diferents variables d'estudi calculades: velocitat del front, caiguda de pressió, avanç del front de flux...s'han graficat per tal de poder analitzar el comportament del dispositiu de mesura davant del fenomen microfluídic i d'aquesta manera poder comparar els resultats amb els obtinguts a partir de les simulacions. La totalitat dels gràfics obtinguts a partir del postprocessat de les dades dels experiments, així com les dades obtingudes a partir de les proves realitzades, es mostren al document **ANNEX I: PROTOCOL DE TESTEIG – GRÀFICS DELS RESULTATS OBTINGUTS**.

A partir dels gràfics de velocitat realitzats es comprova com en l'instant inicial en què la superfície dels conductes d'entrada entren en contacte amb els reactius, el front de fluid avança en gran mesura, produint-se una caiguda de pressió elevada del fluid en "l'instant 0" de l'assaig, proporcional a l'augment de velocitat generat en dit instant, posant-se de manifest la proporcionalitat existent entre velocitat i caiguda de pressió.

La proporcionalitat existent entre velocitat i caiguda de pressió es posa de manifest a la il·lustració 38, on es realitza la regressió lineal entre la velocitat i la caiguda de pressió produïdes a la prova experimental realitzada pel dispositiu A017 pel seu conducte dret (3), obtenint-se una  $R^2 = 0,98$ :



Il·lustració 38: Línia de tendència mostrada per la velocitat del front de flux respecte la caiguda de pressió – Font: Autor

Tal com es mostra a la il·lustració anterior, la regressió mostra com la proporcionalitat entre les variables és pràcticament d'1, essent la velocitat un paràmetre clau en la generació de la caiguda de pressió sobre el fluid, tal com es dedueix en primera instància de l'equació de Darcy per medis porosos.

A la pàgina següent es mostren 2 gràfics un sobre l'altre, on s'observa la proporcionalitat existent entre les variables de velocitat i pressió per l'inlet dret del sensor A017 (v7 amb conductes inclinats a 45°), del qual es presenten la resta dels gràfics a l'annex citat anteriorment.

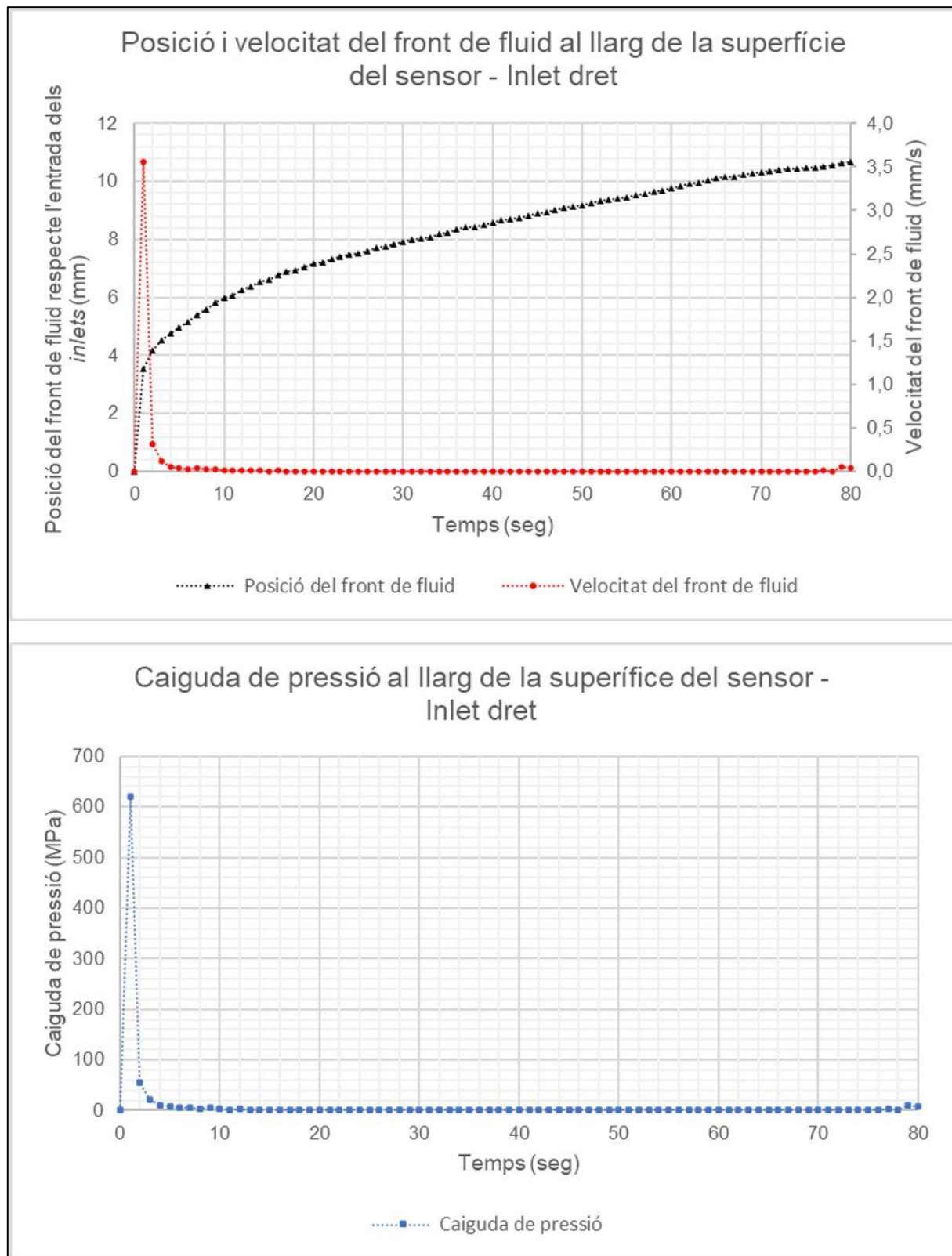
Pel que fa a la velocitat, s'observa com en l'instant inicial aquesta arriba a un valor màxim de 3,6 mm/s, i a continuació comença a decreixer el seu valor, adoptant ràpidament un règim fluídric laminar degut a les característiques poroses del substrat utilitzat, adoptant valors molt propers a 0 mm/s. Tanmateix, s'observa com el flux no s'estanca i aquest manté un moviment continuat al llarg de la superfície del conducte d'entrada.

Centrant-nos en la caiguda de pressió, s'observa com la morfologia descrita per la variable calca a la morfologia seguida per la velocitat del front, tenint el pic màxim de pressió a l'instant inicial en 620 Mpa i a continuació iniciant la mateixa devaluació que pateix la velocitat del front, en un rang de valors diferent.

Considerant que són els conductes d'entrada els que caracteritzen la caiguda de pressió del flux, ja que en arribar a la zona d'intersecció el moviment dels reactius ja s'ha estabilitzat, s'observa com la superfície del substrat genera una caiguda de pressió elevada, on el front del flux tarda 80 segons en arribar a la zona central del dispositiu, assegurant una velocitat mínima a la zona d'intersecció per assegurar una correcta difusió



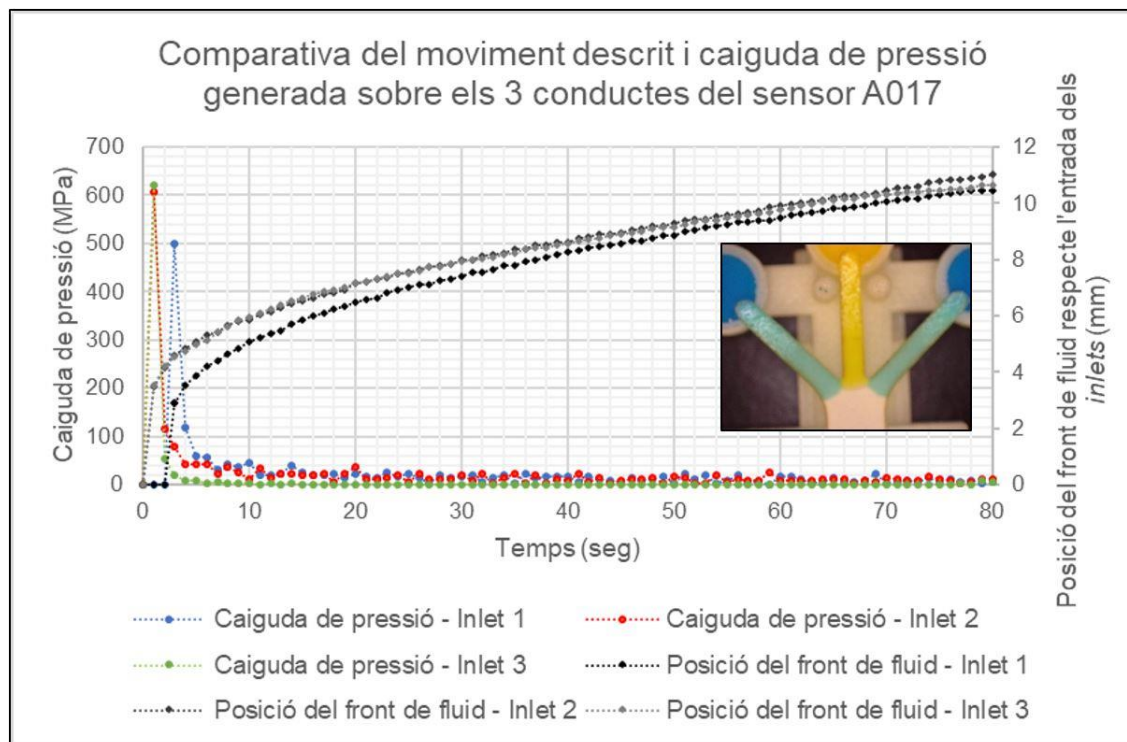
dels 3 reactius a la zona central (contra més lent sigui el moviment de flux, millor serà la difusió a la zona mitja).



*Il·lustració 39: Gràfics obtinguts a partir del post processat de les dades extretes a partir de les proves del laboratori, on s'observa la proporcionalitat existent entre les variables de velocitat i caiguda de pressió respectivament – Font: Autor*



Considerant ara els 3 conductes d'entrada d'un mateix sensor v7, s'observa el comportament equitatiu entre ells a través de la superposició dels senyals. Es presenta a continuació el gràfic obtingut a partir de la superposició dels senyals obtinguts pels diferents conductes del sensor A017 on es pot observar el comportament seguit per cadascun dels *inlets* del dispositiu de mesura.



Il·lustració 40: Caigudes de pressió i moviment del front de flux al llarg dels conductes del sensor A017, el qual ha mostrat sincronització dels fluxos en arribar a la zona d'intersecció – **Font:** Autor

El moviment dels reactius al llarg dels diferents conductes d'un sensor són equitatius entre si, mostrant-se a la il·lustració 40 anterior la sincronització en arribar a la zona central del sensor, necessària per la correcta difusió entre reactius.

La nomenclatura usada a l'hora de diferenciar els conductes dels dispositius de mesura ha estat:

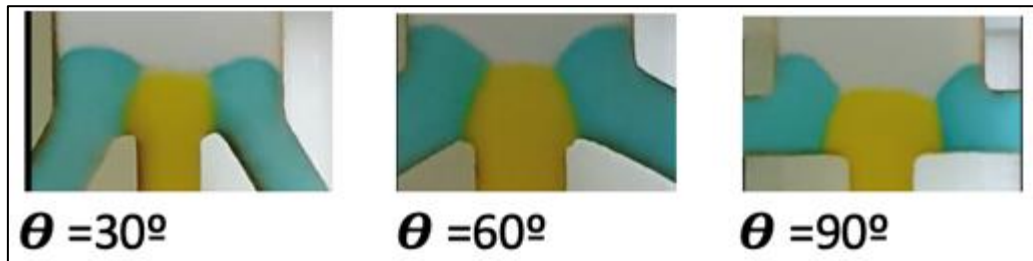
REFERÈNCIA DELS CONDUCTES D'ENTRADA	
Inlet 1	Esquerra
Inlet 2	Central
Inlet 3	Dret

Taula 14: Referència utilitzada a l'hora de diferenciar els conductes d'entrada dels dispositius de mesura – **Font:** Autor

Es pot observar al gràfic anterior com hi ha petites diferències entre els senyals obtinguts, com per exemple el retard que pateix l'inlet 1 en iniciar el moviment al llarg de la seva superfície, així com els conductes 2 i 3 generen una caiguda de pressió addicional de 100 MPa, tot i que això suposa un error mínim en l'arribada dels reactius a la zona central (la diferència de posició final mínima), observant-se la correcta sincronització dels fronts de flux.

A part dels sensors tipus v7 amb angle d'inclinació de 45°, s'han fabricat altres variants del sensor, prèviament simulades, per comprovar si s'aconsegueix sincronització òptima amb diferents inclinacions dels conductes.

Es mostra a la il·lustració 41 els resultats obtinguts per inclinacions de 30, 60 i 90 graus respectivament.



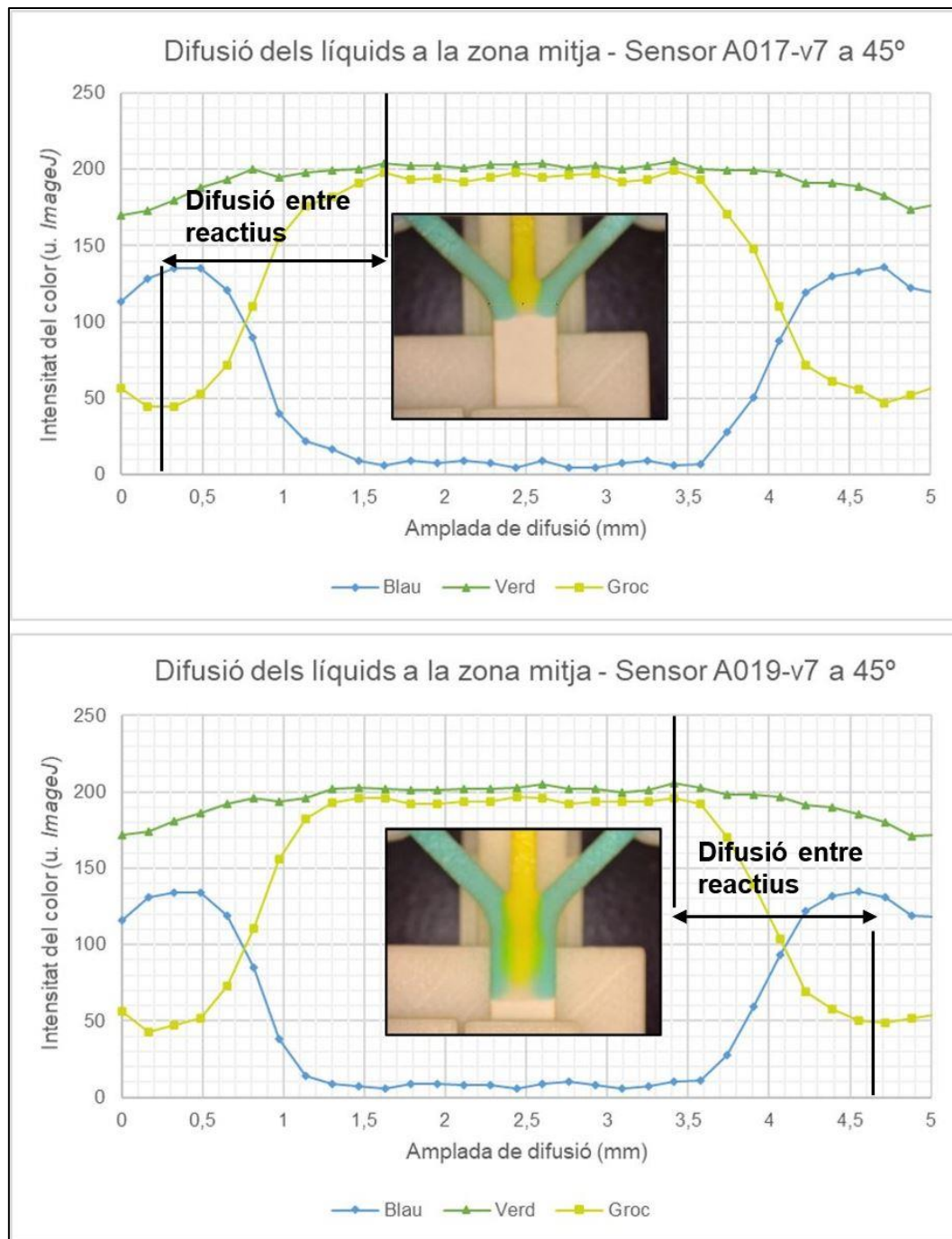
*Il·lustració 41: Sincronització obtinguda amb variants d'inclinació pel sensor v7 per 30°, 60° i 90° respectivament – Font: Casals Terré, Jasmina*

S'observa a partir de la il·lustració anterior com per diferents angles d'inclinació, la sincronització obtinguda és òptima, comprovant d'aquesta manera el correcte funcionament del sensor v7 per diferents inclinacions dels seus conductes laterals, així com del mecanisme de sincronització, el qual mostra adaptabilitat per diferents tipus de sensors a través del canvi de dipòsit dels reactius, aprofitant que es tracta d'una peça extraïble.

Pel que fa a la difusió obtinguda a les proves del laboratori, aquesta ha estat analitzada a través del programari *ImageJ*, a través del qual s'ha analitzat el perfil RGB de color per mitjà d'una línia d'estudi, de la mateixa manera que s'ha realitzat amb *Ansys Fluent* per la difusió del UDS, però ara aplicat a la realitat.

A partir dels valors d'intensitat de color enregistrats pel *software*, podem realitzar la conversió de px a mm, ja que les imatges analitzades han estat realitzades a través del microscopi DinoLite (el microscopi dóna les dimensions a escala 1:1).

Es mostren a la pàgina següent els gràfics de l'amplada de difusió generada per dos sensors v7 amb conductes inclinats a 45°, realitzats a partir de les dades derivades del diagrama realitzat amb *ImageJ*.



Il·lustració 42: Gràfics de l'amplada de difusió obtinguts a partir de les proves de laboratori dels sensors A017 i A019 respectivament – Font: Autor

S'observa a la il·lustració 42 anterior la similitud en la difusió adoptada en ambdós dispositius, essent la difusió pràcticament idèntica pel que fa a amplada i morfologia.

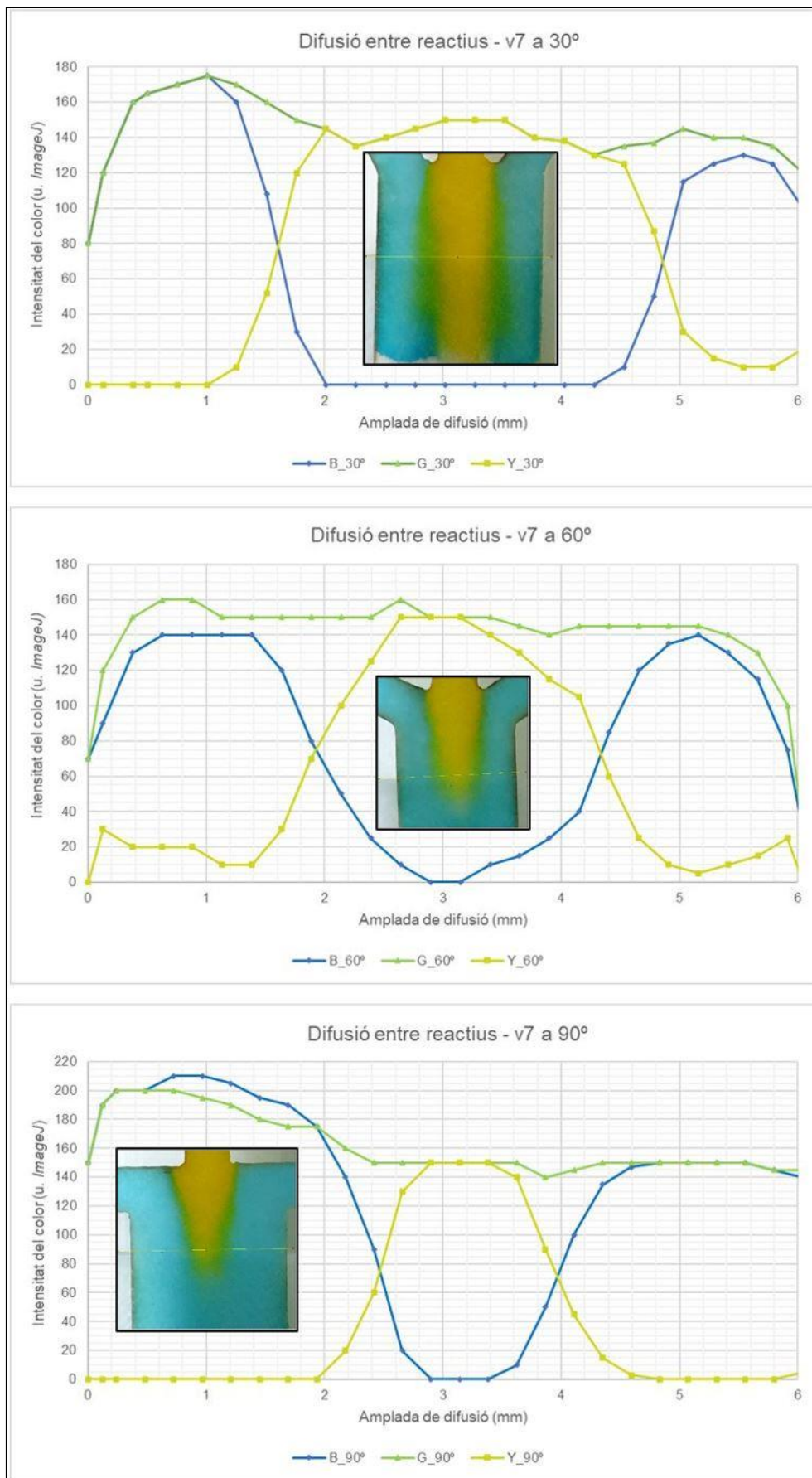
Pel sensor A017 s'aconsegueix una amplada de difusió d'1,4 mm a banda esquerra i 1,2 mm a banda dreta, mentre que per al sensor A019 obtenim amplades de difusió d'1,45 mm i 1,2 mm per les bandes esquerra i dreta aproximadament. Així doncs, s'observa com, tot i petites diferències d'amplada, la difusió és pràcticament la mateixa en ambdós sensors, a cadascuna de les bandes del substrat de paper.

S'han realitzat proves amb diferents inclinacions dels conductes laterals, tal com s'ha mostrat amb anterioritat, on s'observa com la sincronització que s'aconsegueix és òptima i tots 3 reactius conflueixen a la zona central pràcticament a l'hora. A més, s'ha realitzat l'anàlisi RGB d'aquestes altres proves.

A partir dels gràfics obtinguts s'observa com l'amplada de difusió guarda una relació inversament proporcional, tal com es preveia a partir de les simulacions realitzades, amb l'angle d'inclinació dels conductes laterals respecte del central, ja que contra més gran és l'angle, més curta i inestable és la difusió que es genera entre els reactius amb motiu de l'augment de velocitat a la zona d'intersecció.

A la il·lustració 43 es mostren els gràfics de difusió extrets a partir del perfil RGB per sensors v7 amb 30°, 60° i 90° d'inclinació respectivament, on es demostra el fet explicat amb anterioritat:



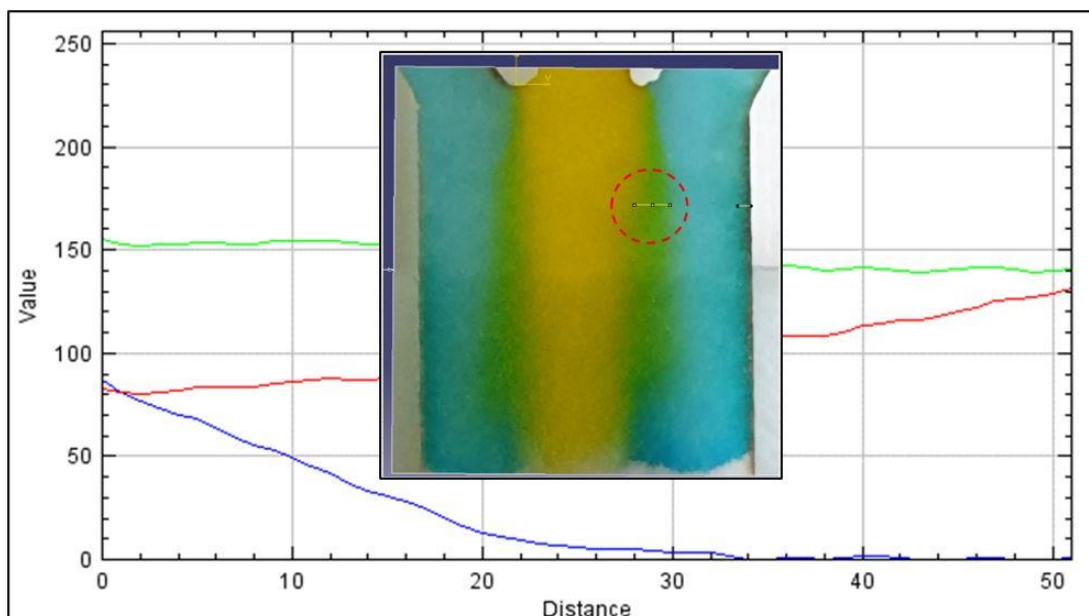


II·lustració 43: Difusió entre els reactius de les proves realitzades al laboratori per sensors v7 inclinats a 30°, 60° i 90° respectivament – **Font:** López Martínez, Joan Antoni – **Adaptat:** Autor

A la il·lustració anterior es posa de manifest el bon comportament del sensor v7 amb conductes laterals inclinats a  $30^\circ$ , aconseguint amplades de difusió d'1,2 mm i 1,5 mm aproximadament per cadascuna de les bandes del dispositiu de mesura. Cal dir que les mesures són aproximades i existeix un cert error a l'hora de mesurar l'amplada de manera exacta, però això no impedeix poder analitzar el comportament del substrat davant la difusió dels reactius a la seva zona central i a l'hora tindre un valor de referència sobre l'amplada de difusió generada sobre el substrat.

A través de les “rampes” visualitzades als gràfics podem obtenir les amplades de difusió entre reactius generades a la zona central del substrat. S'observa com per angles d'inclinació dels conductes laterals superiors, la difusió no perdura de la mateixa manera, i inclús per al cas de  $\theta = 90^\circ$ , la difusió genera una zona morta en una distància mínima ja que el colorant central és incapaç de difondre vers els reactius laterals, arribant a velocitat 0 i per tant finalitzant la seva difusió.

Per altra banda, a través de l'anàlisi de “línia” de la difusió entre colorant central i reactiu lateral, mostrat a la il·lustració 44, s'obté el següent resultat (**la línia s'ha traçat de dreta a esquerra**):



Il·lustració 44: Anàlisi de la difusió únicament tenint en compte la mescla entre colorants groc i blau, a la banda dreta del substrat – **Font:** López Martínez, Joan Antoni – **Adaptat:** Autor

Analitzant únicament la difusió on hi ha mescla dels colors groc i blau a través del perfil RGB “verge” generat per l'*ImageJ*, podem observar com a la banda esquerra de la línia, just en començar el color verd, tenim Verd = 140 i Blau = 0, mentre que a la banda dreta, just abans “d’acabar-se” la difusió entre reactius, tenim valors d’intensitat de Verd = 155 i Blau = 90.

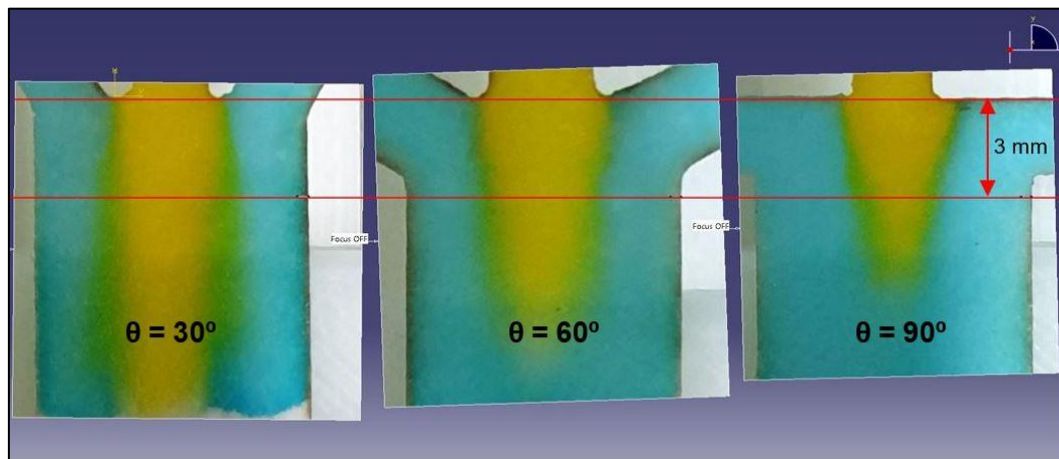
D’aquesta manera podem saber el valor “0” del color blau, el qual és de **90**, així com podem deduir que en tenir lectura únicament de color blau, el *software* dona un valor de color verd (present en el color blau) de **155**. Les proves realitzades amb diferents angles d’inclinació s’han hagut de realitzar fora de l’escola amb motiu de l’estat d’alarma, pel que la lluminositat amb la qual s’han realitzat les proves, així com els dispositius emprats no han estat els mateixos que els que trobem disponibles al laboratori, pel que els valors d’intensitat de color esmentats no són valors fixos, sinó que haurem de considerar una tolerància aproximada de **±20** d’intensitat de color.



Aquest anàlisi ens permet saber ràpidament quan s'inicia la difusió entre els reactius, ja que al tindre lectures d'intensitat de color blau de 90 voldrà dir que el colorant blau ha començat a difondre amb el colorant groc, ja que és a partir d'aquest valor que sabem que el blau es troba present en la difusió amb el colorant groc. D'aquesta manera podem saber aproximadament les amplades de difusió a través del perfil RGB generat pel *software* sense graficar posteriorment amb *Excel*, sempre que sapiguem la conversió de px a mm, com és el cas de l'estudi si tractem imatges provinents del programari *DinoCapture*.

Al no disposar del microscopi DinoLite a la part final de l'estudi, les gravacions de les proves experimentals s'ha realitzat amb mòbil. Les fotografies de difusió realitzades s'han exportat al *software* CATIA V5, el qual permet realitzar el redimensionat de les fotografies i d'aquesta manera poder realitzar la comparació de les amplades de difusió generades per diferents inclinacions dels conductes laterals dels dispositius directament.

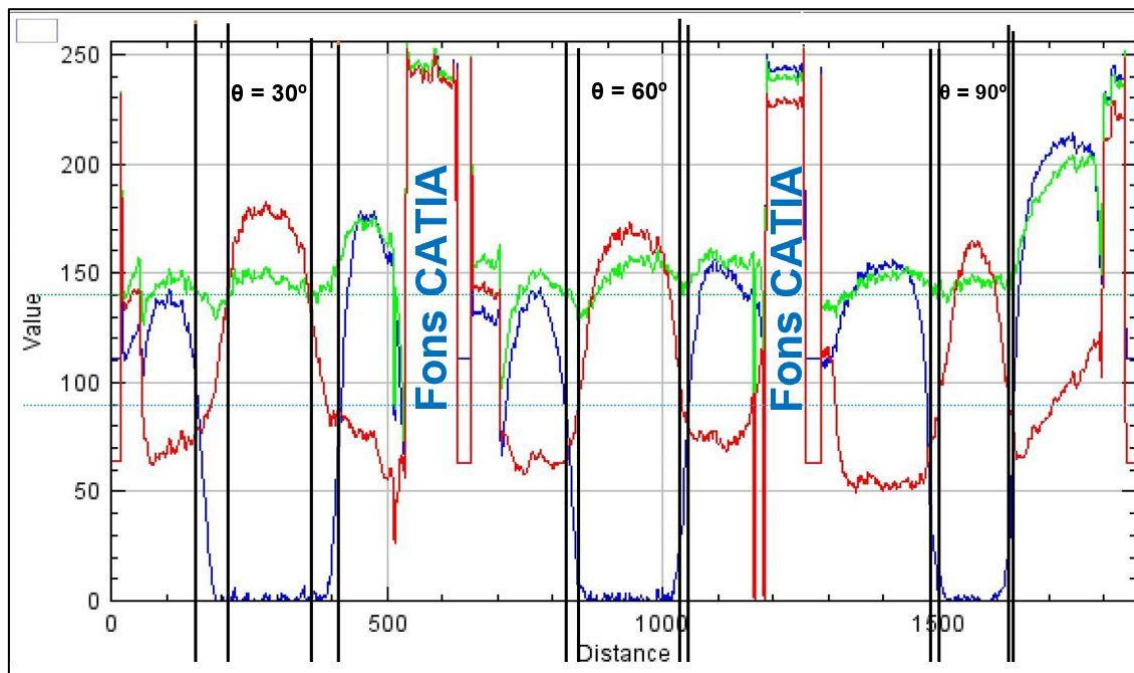
A la il·lustració 45 següent es mostra el retall de les fotografies al CATIA, on s'indica la línia d'estudi utilitzada per l'obtenció dels gruixos de difusió, situada a 3 mm de la zona d'intersecció entre conductes d'entrada i zona central del dispositiu:



Il·lustració 45: Fotografies realitzades amb mòbil exportades per al seu escalat a CATIA, fent possible la seva comparació directa en quant a l'amplada de difusió obtinguda per inclinacions de  $30^\circ$ ,  $60^\circ$  i  $90^\circ$  respectivament – **Font:** López Martínez, Joan Antoni – **Adaptat:** Autor

Al estar totes 3 fotografies escalades, s'ha realitzat l'anàlisi de línia de la difusió de totes 3 fotografies a l'hora, a una distància de 3 mm respecte de la frontera d'intersecció conducte-zona central.

Es mostra a continuació la il·lustració 46 el perfil RGB obtingut a partir de l'anàlisi de les 3 difusions:



*Il·lustració 46: Perfil RGB generat amb ImageJ a partir de 3 fotografies consecutives presentades a la il·lustració anterior, corresponents a la difusió entre reactius per 30°, 60° i 90° d'inclinació respectivament – Font: López Martínez, Joan Antoni – Adaptat: Autor*

A partir de la il·lustració anterior es poden observar ràpidament les rampes de color generades, corresponents a les difusions a banda i banda del dispositiu. Els gruixos de difusió per cadascun dels dispositius es destaquen amb línies verticals negres, fent visible com a major angle d'inclinació, més petita és l'amplada de difusió entre reactius, mostrant la relació inversament proporcional entre angle d'inclinació i amplada de difusió, comentada amb anterioritat.

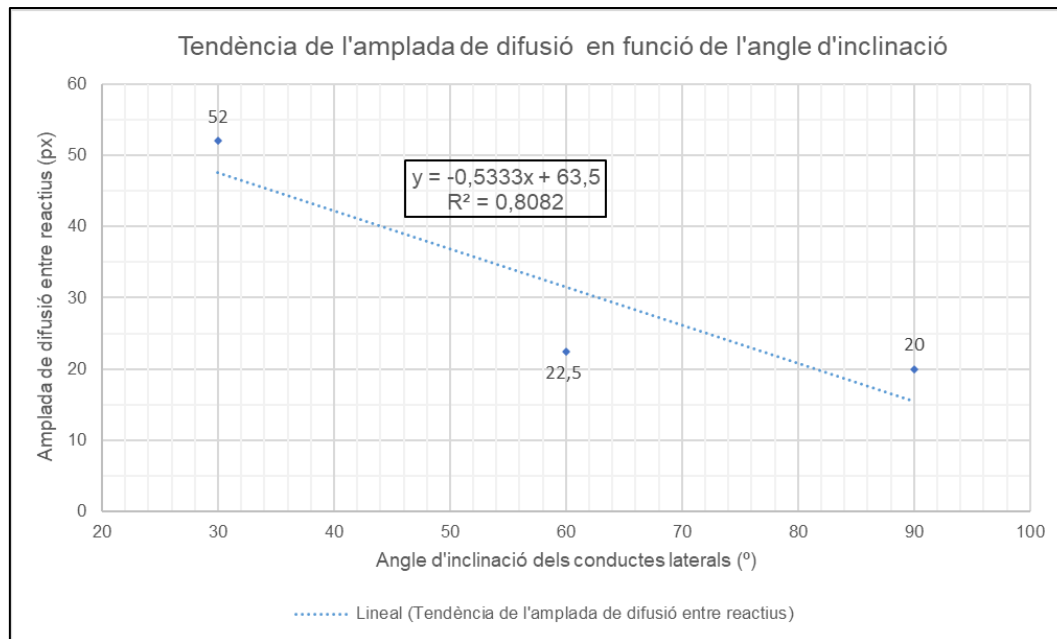
A partir dels valors de distància en px, s'obté una mitjana d'amplada de difusió entre els dos costats del dispositiu detallada a la següent taula:

Amplada de difusió generada (valor mig)	
Angle d'inclinació entre conductes (°)	Valor mig d'amplada (px)
30	52
60	22,5
90	20

*Taula 15: Mitjana de l'amplada de difusió obtinguda amb els diferents angles d'inclinació dels conductes laterals – Font: López Martínez, Joan Antoni – Adaptat: Autor*

A través de la taula anterior es genera la línia de tendència de l'amplada de difusió, per tal de deduir de manera aproximada l'amplada de la difusió que es podrà assolir en funció de l'angle d'inclinació  $\theta$  dels conductes laterals respecte del central, de la mateixa manera que s'ha realitzat a partir de les amplades obtingudes a les simulacions a l'apartat anterior.

Es mostra a la il·lustració 47 la línia de tendència seguida per l'amplada de difusió entre els reactius a través de les proves realitzades, la qual ens ajuda a predir quina serà l'amplada de difusió generada a la zona central del substrat basant-nos en els resultats obtinguts a través de les proves experimentals.



*Il·lustració 47: Tendència mostrada per l'amplada de difusió en funció de l'angle d'inclinació dels conductes laterals obtinguda a través de les proves experimentals realitzades amb dispositius de mesura inclinats a 30, 60 i 90 graus – Font: López Martínez, Joan Antoni – Adaptat: Autor*

S'observa en primera instància com la regressió obtinguda no és tan bona com a les simulacions ( $R^2 = 0,81$ ). Tanmateix, s'han de considerar en tot moment els diferents paràmetres d'incidència a les proves experimentals (velocitat d'accionament del cargol, tremolors presents en el moviment, imperfecció de la superfície del substrat...), els quals no es contemplen a les simulacions. A més, amb motiu de la pandèmia de la COVID-19, les proves experimentals s'han hagut de realitzar fora de les instal·lacions amb diferent material, i únicament per 30°, 60° i 90° respectivament (al no disposar de tants punts de mesura, la precisió de la regressió es veu afectada).

Tanmateix, a partir de la tendència de l'amplada de difusió graficada, es corrobora el bon comportament mostrat pels dispositius amb angles d'inclinació reduïts, mentre que per angles d'inclinació dels conductes superiors, la difusió generada no és òptima, principalment degut a l'augment de velocitat generat a la zona d'intersecció (canvi de secció), la qual no és desitjable si es volen obtenir gruixos de difusió elevats, com és el cas de l'estudi. Encara que la regressió obtinguda no sigui tan exacte en comparació a l'obtinguda a les simulacions, ens permet predir el comportament que tindran els dispositius de mesura per diversos angles vers el fenomen de difusió, principal objectiu a l'hora de realitzar els gràfics de línia de tendència.

Per finalitzar el present apartat, mencionar que l'angle mínim d'inclinació amb el que s'han realitzat proves ha estat de  $\theta = 30^\circ$ , degut a que angles menors dificultarien el disseny del dipòsit per la falta d'espai entre els 3 contenidors, havent de dissenyar un dipòsit amb els contenidors compartits, pel que la utilització de reactius diferents no seria possible.

## 10. Salut, Sostenibilitat i Medi Ambient

Pel que fa a l'àmbit de la salut, no s'ha treballat amb substàncies perilloses durant les proves de fluid al laboratori que poguessin ocasionar corrosió o intoxicació, les quals han estat principalment aigua i colorant alimentari, de manera que l'operari no ha patit cap risc a l'hora de la realització dels experiments ni són necessaris cap classe d'EPI.

El material i eines utilitzades en dites proves no presenta perillositat. A banda del paper, les micropipetes, mecanismes de sincronització, pinces de subjecció, planxes de paper...no suposen risc pel tècnic encarregat de la realització de les proves.

A part dels avantatges sobre l'anàlisi de pH a partir del mètode presentat en el present estudi, que s'han explicat al llarg del present document, com ara: mínim esforç econòmic, estudi *POC*, realitzable per qualsevol operari, repetibilitat en les proves amb fluid..., es tracta d'un mètode sostenible i respectuós amb el medi ambient.

El paper normalitzat *Whatman N°05* s'ha aprofitat pel tallat del màxim nombre de sensors per cercle de material, aprofitant gran part de la superfície de paper. Per altra banda, el sobrant pot servir per altres investigacions del Dept. d'Enginyeria Paperera i Gràfica de l'ESEIAAT, podent aprofitar el material per la realització de recerca científica. A més, l'anàlisi del comportament del paper utilitzat a l'estudi en el sí microfluídic també ha servit per poder transmetre els resultats al Dept. d'Enginyeria Paperera i Gràfica, de manera que s'han aprofitat les proves de fluid per diverses branques d'estudi.

Pel que fa al reciclatge del paper, els residus són fàcilment reciclables a través dels contenidors habilitats, amb els quals podem allargar-ne la seva vida útil donant-li un 2<sup>n</sup> ús. Així doncs, en quant al paper utilitzat per les proves de fluid, es tracta d'un material respectuós amb les 3 R's: *Reduce, Reuse & Recycle*

Els sensors de paper desenvolupats mostren bon funcionament davant del sí microfluídic, de manera que es tracta de dispositius que no necessiten grans quantitats de reactiu per al seu correcte funcionament, utilitzant-se únicament 60 µl de reactiu per contenidor per la realització de les proves al laboratori. A més, es tracta d'un material que permet obtenir dispositius de mesura sense necessitat de gastar matèries primeres de manera innecessària, evitant la generació de residus en comparació a altres mètodes de mesura del pH actuals que no són tan flexibles pel que fa al seu reciclatge i reaprofitament.

El mecanisme, fabricat a partir de plàstic ABS, disposa de diferents peces, les quals són totes elles reutilitzables. Pel que fa al material utilitzat, s'ha plantejat la fabricació del mecanisme a partir de plàstic PLA, material biodegradable, un cop es requereixi alguna modificació del mecanisme de sincronització actual. Per a la seva neteja, s'ha utilitzat una mínima quantitat d'aigua i posteriorment aire a pressió provinent de la xarxa de l'escola per procedir al seu rentat, evitant restes de fluid a les peces, podent això afectar a les proves següents.

L'obtenció dels sensors de paper s'ha realitzat a través de tall làser, utilitzant l'espai del FabLab Terrassa per la realització dels talls. El tall làser d'un material és, en altres paraules, el cremat de dit material seguint unes coordenades. En cremar el material, es generen residus sòlids, els quals poden ser nocius per la salut, ja que alguns dels residus sòlids es poden respirar.

Durant els talls làser dels sensors s'han seguit les normes de seguretat del FabLab Terrassa, sota la supervisió del responsable del taller, Javier Hernández. La màquina de tall làser professional *BCN3D Ignis* amb la que s'han realitzat els talls disposa de comporta protectora, de manera que no són necessaris cap tipus d'EPI de protecció ocular ni guants

especialitzats per la realització dels talls (la màquina només permet iniciar el tall un cop la comporta es troba totalment tancada).

Les instal·lacions de FabLab Terrassa segueixen la normativa vigent europea d'extracció i filtratge de gasos 2008/98/CE, pel que la gestió i reciclatge de residus ha estat gestionada per l'entitat mencionada, prenent totes les mesures de seguretat i control.

Finalment, si ens centrem en el consum elèctric de la màquina, tot i tractar-se d'una màquina d'elevada potència, aquesta es pot configurar en funció del material que es desitgi tallar. Tal com es menciona a l'apartat 4.1.4, a través del software associat a la màquina s'ha configurat el tall amb una potència del 7%, essent el consum elèctric mínim per la realització dels talls.

## 11. Conclusions de l'estudi i altres vies d'investigació

### 11.1 Conclusions de l'estudi

Primerament, es conclou que s'ha aconseguit dissenyar i validar un sensor de pH basat exclusivament en paper, el qual ha mostrat una bona repetibilitat a partir de les proves realitzades al laboratori. Per tant, aquest dispositiu es pot considerar un bon candidat a la seva aplicació de cara a l'ús en àmbit sanitari per la realització d'anàlisis al costat del pacient si es corrobora el bon funcionament amb reactius de molaritats diferents.

Es destaquen a continuació les conclusions assolides a partir de la realització de l'estudi pels diferents apartats que s'hi han desenvolupat:

#### **Importància del mecanisme de sincronització**

El principal inconvenient a resoldre a l'inici de l'estudi era la poca repetibilitat que mostraven els dispositius de mesura abans de l'inici de l'estudi. Per tal de poder entendre el funcionament i els inconvenients que podien sorgir, es van realitzar inicialment talls de diferents dissenys de sensors per tal de testejar-los i comprovar el comportament del conjunt sensor-mecanisme.

A les proves inicials realitzades al laboratori s'ha pogut comprovar la rellevància del mecanisme de sincronització a l'hora de la realització dels experiments, ja que a l'inici de l'estudi es van poder comprovar les tremolors generades pel propi accionament manual del mecanisme, les quals provocaven la mala sincronització del contacte entre la superfície del substrat i els reactius, així com la col·locació del dispositiu de mesura, la qual es tracta d'una operació que fàcilment podia doblegar-lo i malmetre'l.

S'han dissenyat i fabricat un total de 6 mecanismes de sincronització fins a aconseguir el funcionament desitjat, reduint progressivament el "joc" existent entre peces als mecanismes inicials i realitzant el redisseny de peces per tal de malmetre el mínim possible el dispositiu de mesura a l'hora de col·locar-lo a l'encaix corresponent. S'ha arribat a un disseny final de mecanisme que mostra repetibilitat en els seus resultats, però a l'hora és de fàcil manipulació, el qual fa que qualsevol tècnic el pugui utilitzar amb facilitat. El sistema és fàcilment desmuntable i permet extreure amb facilitat el dipòsit dels reactius, per tant, permet realitzar diverses proves en un temps curt, així com poder realitzar proves amb dispositius de morfologia variada. A més, es tracta d'un mecanisme fàcil de produir a través de la impressió 3D, en auge els darrers anys i un procés de fabricació considerablement barat.

Finalment, també s'ha pogut comprovar la dualitat existent entre el correcte disseny del mecanisme de sincronització així com el del sensor de pH en qüestió, el qual tot i ser clau en la realització dels experiments degut a les seves propietats materials i morfològiques, sense el funcionament òptim del mecanisme els resultats obtinguts no haguessin mostrat la mateixa repetibilitat.



## Simulacions amb *Ansys Fluent*

*Ansys Fluent* ha mostrat ser una eina amb gran funcionalitat dins el present estudi, el qual ens ha permès realitzar el prototipatge dels dispositius de mesura, vital per tal de reduir temps i costos innecessaris (predicció del mal comportament dels dissenys), optimitzant d'aquesta manera la metodologia de treball utilitzada, evitant convertir l'estudi en un *try & error* constant. A més, el moviment descrit pels reactius a través de la superfície del substrat és analitzable a través de les equacions de Navier-Stokes, les quals són expressions no aplicables a un sistema lineal. Pel motiu anterior, és vital la utilització d'un *software* basat en elements finits per la correcta resolució del model.

Un cop dissenyat i testejat el sensor v7 "original" (conductes d'entrada inclinats  $45^\circ$ ), el *software* ha permès la comprovació del comportament del dispositiu pel que fa a la difusió generada a la seva zona central sense necessitat d'haver de fabricar totes les variants. S'ha pogut comprovar la relació inversament proporcional que existeix entre l'amplada de difusió a la zona central del substrat respecte de l'angle d'inclinació  $\theta$  dels conductes laterals vers el central amb motiu de l'augment de velocitat que es genera a la zona d'intersecció a causa de l'augment de l'angle d'inclinació (canvi de secció més "agressiu").

A més, destacar la utilitat de la *grid independency analysis* realitzada per les simulacions, la qual ha permès trobar la mida de cel·la mínim per a la convergència òptima dels resultats, essent aquest un valor fix per la totalitat de les simulacions realitzades sense necessitat d'invertir temps excessiu en la realització d'un mallat extremadament fi.

Així doncs, es corrobora el bon funcionament del *software* utilitzat per les simulacions, el qual ha permès introduir els diferents paràmetres característics del material dins el codi CFD de resolució per tal de realitzar simulacions el més fidels a la realitat possibles, permetent predir el comportament de diferents versions de sensor, així com diferents variants d'un mateix sensor, com ha estat pel cas del sensor v7, amb el qual s'ha pogut comprovar la variant del disseny amb la que s'obtenen els resultats més òptims, amb  $\theta = 30^\circ$  pels conductes laterals respecte del central.

Es pot afirmar que s'ha aconseguit obtenir un model de simulació òptim amb el qual els resultats convergeixen i es corresponen amb els obtinguts a la realitat, poden realitzar futures simulacions amb substàncies de molaritat diferents

## Funcionament dels dispositius de mesura. Proves experimentals

A través de l'anàlisi dels resultats obtinguts a les proves experimentals, realitzat a l'apartat 9.2, es pot afirmar com el substrat escollit per l'obtenció dels sensors de pH (*Whatman N° 05*) genera la caiguda de pressió esperada sobre el moviment del fluid, adoptant un règim laminar simètric, convenient per la lectura de color i l'amplada de la difusió dels reactius a la zona central del dispositiu, aprofitant la proporcionalitat existent entre la velocitat del front de flux respecte la caiguda de pressió generada per la porositat del substrat. Així doncs, es confirma la correcta lectura, tant del color i intensitats adoptades pels analits, així com l'amplada de difusió entre reactius generada a la zona central del substrat, podent-se mesurar amb facilitat per mitjà d'*ImageJ*.

Per altra banda, per mitjà de la metodologia explicada a l'apartat 9.2 anterior, s'aconsegueix trobar el valor "0" dels reactius laterals, pel que es pot calcular molt ràpidament l'amplada de difusió únicament a través del perfil RGB generat per *ImageJ*, sense necessitat d'haver d'exportar les dades i tractar-les per la lectura de l'amplada de difusió (molt útil si es desitja obtenir un valor aproximat amb exactitud considerable ràpidament).

Centrant-nos en la morfologia dels dispositius de mesura, totes les variacions morfològiques segueixen el mateix principi de funcionament, pel que les modificacions entre versions es realitza vers la morfologia dels extrems dels conductes d'entrada, així com l'angle d'inclinació dels conductes laterals vers el central. L'amplada dels conductes d'entrada ha mostrat no ser un paràmetre incident pel que fa a la difusió generada a la zona central, a més d'obligar a disposar d'una zona central de major secció, pel que no es podria aprofitar en la mateixa proporció el substrat de paper.

S'ha pogut comprovar a través de les proves experimentals com els sensors v7 mostren millors resultats degut a la morfologia de l'entrada dels seus conductes, la qual disposa d'un arrodoniment que assegura el contacte entre substrat i reactiu tot i la presència de tremolors en l'accionament del mecanisme. En canvi, amb dispositius de mesura v2 (amb puntes dels conductes d'entrada "retallades" amb un cert radi), els tremolors provoquen un mal contacte entre substrat i reactiu (fins i tot de per algun dels conductes laterals aquest no s'arriba a produir).

Es conclou com els sensors v7 amb angles d'inclinació entre conductes menors, en un rang de  $30^\circ \leftrightarrow 45^\circ$ , mostren millors resultats degut a que el canvi de secció produït a la zona d'intersecció entre els conductes laterals i el cos central del dispositiu no és tan abrupte com és el cas dels dispositius amb angles d'inclinació superiors.

Els sensors amb  $\theta$  inferiors generen amplades de difusió superiors a causa de les velocitats moderades produïdes just a les sortides dels conductes, donant una millor "lectura" de la difusió, motiu pel qual s'ha aprofundit en l'anàlisi d'aquests.

Els dispositius de mesura amb angles  $\theta < 30^\circ$  no s'han considerat degut a que tot i que a nivell analític els resultats obtinguts eren òptims, s'ha pogut comprovar com amb angles mínims, no hi hauria espai suficient per poder ubicar 3 contenidors per separat, impossibilitant la realització de l'experiment amb 3 reactius diferents, utilitat per la qual els sensors s'han dissenyat amb 3 conductes.

Així doncs, els sensors amb angles d'inclinació dels conductes laterals compresos en un rang de  $30^\circ \leftrightarrow 45^\circ$  mostren resultats òptims així com repetitius, amb els quals s'aconsegueix una lectura del color i amplada de difusió òptima per la finalitat desitjada.

### **Comparació dels resultats: simulacions vs proves experimentals**

Tal com es menciona anteriorment, les simulacions realitzades han permès predir amb exactitud el comportament dels dispositius davant el fenomen de la difusió. Tanmateix, en l'anàlisi dels resultats realitzat a l'apartat 9 s'han observat **2 diferències principals**.

En primer lloc, s'observa com en l'instant inicial (contacte inicial substrat-reactiu) de les proves realitzades al laboratori, es genera un augment sobtat de la velocitat, el

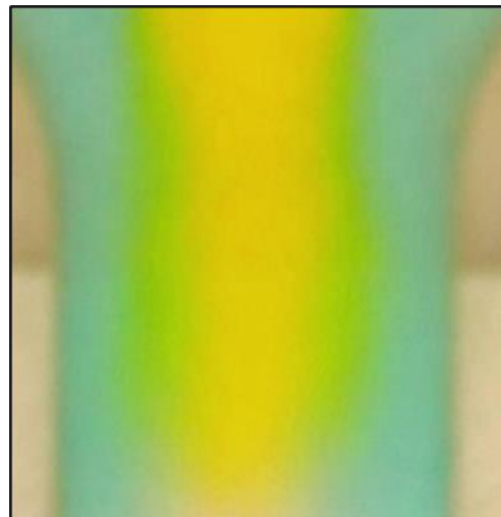
qual suposa un augment de la caiguda de pressió generada sobre el fluid. Aquest fet no s'observa a les simulacions realitzades amb *Ansys Fluent*, principalment degut a que a l'hora de realitzar la simulació, el *software* sobreentén que els reactius ja es troben en contacte amb el substrat del dispositiu i en iniciar els càlculs s'inicia la difusió del reactiu. En canvi, a les proves realitzades, el sensor es desplaça verticalment cap al sensor per mitjà del gir del cargol, el qual s'acciona manualment.

D'aquesta manera, a les proves realitzades al laboratori, la superfície del substrat entra en contacte amb els reactius a una velocitat determinada, la qual serà major o menor depenent del gir que hagi generat l'operari per aquella prova en particular. Aquesta velocitat inicial, intrínseca a l'accionament del mecanisme de sincronització, així com les forces capil·lars generades de sobte sobre la superfície del dispositiu, generen un salt de velocitat/pressió a l'entrada dels conductes que no es veu reflectit a les simulacions degut a que el mecanisme de sincronització no és contemplat pel *software* de simulació.

Tanmateix, s'ha pogut comprovar a les proves experimentals com un cop es genera aquest augment de la velocitat, i conseqüentment un augment de la pressió generada, el flux tendeix a estabilitzar-se en un temps mínim, adoptant un moviment fluidic laminar generat per la porositat del substrat, amb mida del porus del material de l'ordre de  $\mu\text{m}$ .

Per altra banda, a les proves realitzades al laboratori s'han observat certes imperfeccions/curvatures en la difusió produïda a la zona central del dispositiu, les quals es posen de manifest a la il·lustració 48.

Aquestes imperfeccions no són degudes a turbulències, ja que es tracta d'un moviment fluidic que es caracteritza pel seu caràcter laminar (absència de forces inercials). Tanmateix, la difusió sí que pot veure's afectada per la tortuositat present en el substrat, el qual no és 100 % homogeni i en certes zones de la seva superfície la difusió pot veure's afectada. Aquest fet tampoc es contempla a l'hora de realitzar les simulacions, ja que el programari realitza els càlculs basant-se en una permeabilitat ( $K$ ) i una porositat ( $\epsilon$ ) constant al llarg de la seva superfície, quan a la realitat ha quedat demostrat que no és així.



Il·lustració 48: Curvatures presents en la difusió generada sobre la zona central del dispositiu A019 – Font: Autor

Tanmateix, la tortuositat present en el substrat no impedeix la lectura del color i amplada de difusió adoptada pels reactius, pel que tot i la diferència en els resultats de les simulacions, les quals generen un ample de difusió constant al llarg de la zona central del dispositiu, els resultats de les proves són òptims.

Deixant de banda els 2 aspectes comentats anteriorment, els resultats obtinguts a les proves experimentals permeten establir similitud respecte dels obtinguts a les simulacions, ja que els factors de les proves experimentals comentats, intrínsecs al sistema de testeig del que es disposa, no afecten el funcionament general dels dispositius de mesura.

## Estandardització del procés

A l'inici de l'estudi es comprova com des del disseny dels dispositius de mesura fins al seu testeig al laboratori, es realitzen un seguit de tasques influents que afecten el resultat a obtenir.

Tenint com a objectiu principal la repetibilitat de les proves experimentals, es decideix estandarditzar el procés per tal de minimitzar possibles factors que puguin afectar els resultats finals. Es redacta un protocol òptim de testeig, el qual es detalla en profunditat al document **ANNEX I: PROTOCOL DE TESTEIG – GRÀFICS DELS RESULTATS OBTINGUTS**.

D'aquesta manera, qualsevol operari pot seguir la metodologia de treball establerta per al present estudi, permetent la realització de proves futures amb fluids de molaritats diferents seguint el mateix protocol. A més, al realitzar les proves experimentals de la mateixa manera, es minimitzen possibles factors secundaris derivats de diferències entre les metodologies de treball emprades, permetent la comparació directa dels resultats entre les proves experimentals realitzades.

## 11.2 Estudis futurs

### Anàlisi de la funcionalitat del sensor amb substàncies de molaritats diferents

Tal com es menciona a l'inici del present document, amb motiu de la pandèmia de la COVID-19 no s'ha pogut aprofundir en major mesura en el comportament de la difusió de reactius a través del substrat del sensor amb fluids de molaritat i pH diferents, ja que les proves realitzades han estat amb aigua i colorant alimentari i a meitats de l'estudi s'ha deshabilitat l'accés a l'ESEIAAT.

Tanmateix, s'ha aconseguit desenvolupar satisfactòriament el model de càlcul amb *Ansys Fluent*, el qual seria aplicable a les simulacions dels sensors amb altres fluids, de manera que podem considerar el model finalitzat, i per tant, la tasca immediata a realitzar seria la comprovació del comportament del sensor al simular-lo i a nivell experimental al laboratori, per fluids amb molaritats diferents.

### Millora del mecanisme de sincronització

Tot i que finalment s'han aconseguit resultats òptims per mitjà dels sensors v7 junt amb el mecanisme de sincronització 6S\_DEVICE\_H01\_6, s'ha observat al llarg de l'estudi com una de les principals causes per la qual les proves de fluid no disposaven de la repetibilitat desitjada han estat les imprecisions generades per les tremolors del propi mecanisme, el qual les genera a l'hora d'accionar el cargol de gir.

Tal com s'explica en apartats anteriors, es tracta d'un sistema pràctic, econòmic i de fàcil ús, tot i que presenta altres inconvenients, els quals s'han minimitzat al màxim a través de les diferents versions del mecanisme fins arribar a la 6ª i última.

Primerament es va prestar especial atenció en un disseny de sensor amb el qual no es tinguessin inconvenients a l'hora de sincronitzar-se tots 3 *inlets* pel que fa al contacte substrat-reactiu. Tanmateix, posteriorment es va comprovar com el mecanisme afectava de manera crítica a la sincronització, afectant fins i tot en major mesura que algun possible error de disseny dels sensors.

Per estudis propers, convindria desenvolupar el disseny d'un nou mecanisme amb el qual el tècnic pogués desenvolupar les proves experimentals d'una manera més eficaç, amb absència de factors externs, com ara la variabilitat de la velocitat de descens del mecanisme, així com la presència de tremolors.

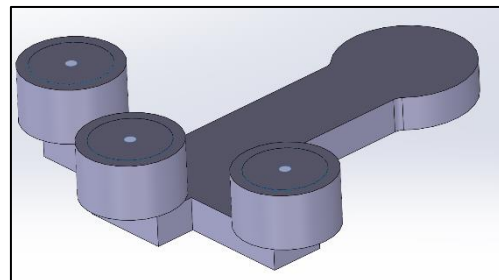
Per altra banda, es podria realitzar una innovació més gran en el sistema de prova, automatitzant el moviment vertical del sensor per tal de reduir les vibracions generades per l'accionament manual del cargol de gir, tot i que s'haurien de tenir en compte els embalaments i possibles xocs provocats pel motor elèctric, pel que una exhaustiva tasca de programació del moviment seria requerida.

Per altra banda, de cara a emprar el sistema en punts de mesura que requereixen resultats immediats, com ara al costat de pacients, seria profitós realitzar el disseny d'una bancada fixa a la qual s'hi pogués fixar el mecanisme de sincronització, per tal d'evitar del tot l'aparició de possibles tremolors i així no haver de repetir la mesura en situacions on el temps és factor clau.

### Nova concepció pels dipòsits de fluid

A causa de la morfologia de les entrades dels conductes del sensor v2, tot i haver obtingut bons resultats a les simulacions, a les proves de fluid realitzades al laboratori han mostrat més complicacions en la sincronització del contacte substrat-fluid pels 3 *inlets* en comparació als sensors v7.

S'ha plantejat un nou disseny de dipòsit amb el qual es creu que aquests tipus de sensor poden funcionar correctament, el qual es mostra a la il·lustració 49. Es creu que aquest tipus de dipòsits permetrien una difusió més homogènia i duradora al llarg de la superfície del sensor, pel que possiblement funcionarien correctament amb altres sensors, inclòs l'v7, el qual ja ha funcionat correctament amb el mètode actual.



Il·lustració 49: Disseny de dipòsit el qual disposa de tapes microperforades per la propagació homogènia dels reactius – Font: Autor

En el futur es podria fabricar aquest nou dipòsit, tot i que s'hauria d'invertir temps en realitzar un bon disseny, que permetés l'ompliment i buidat del dipòsit d'una manera pràctica, ràpida i eficaç sense haver de perdre massa temps en l'ompliment dels recipients amb nous reactius.

Per altra banda, seria molt profitós realitzar el disseny d'un nou dipòsit que permetés la seva aplicació per diferents variants d'un mateix sensor. Per exemple, per aquest estudi s'ha realitzat la simulació de diferents versions del sensor v7, a les quals es modificava l'angle d'inclinació entre els conductes laterals i el central. Amb aquest "nou" dipòsit, la idea seria poder adaptar-lo per al seu ús en diverses d'aquestes variants de sensor, el qual es podria realitzar per mitjà d'articulacions, incorporades a la mateixa peça.



Tot i que suposaria una tasca difícil de disseny, permetria aprofitar un mateix dipòsit per diversos sensors, sense necessitat d'haver de realitzar una gran quantitat d'impressions 3D per cadascuna de les variants d'un mateix tipus de sensor i permetria millorar la repetibilitat de les proves, sense necessitat d'un canvi de concepció del mecanisme de sincronització a nivell general, com es contempla amb anterioritat.

### **Estudi de la uniformitat del paper**

Durant el postprocessat de les dades extretes a partir de les proves de fluid realitzades s'ha pogut comprovar com, tot i la laminaritat general mostrada pels sensors de paper vers la difusió de fluid, hi ha certes zones de la seva superfície en el que apareixen petits desviaments pel que fa a la difusió. Aquestes disparitats de difusió no apareixen a les simulacions realitzades amb Ansys Fluent, tal com es menciona a l'apartat anterior.

La no homogeneïtat de la difusió pot ser deguda a petits defectes en la superfície del material, com ara desordre de les fibres de cel·lulosa, o bé alguna deformació que hagi pogut patir el sensor a l'hora de manipular-lo. Aquestes petites deformacions s'han minimitzat per mitjà de l'ús de planxes especialitzades en paper (planxat en fred), tot i que les deformacions de nivell microscòpic poden romandre.

Una tasca futura podria ser l'anàlisi i comparativa de substrats amb característiques diferents (mida del porus, llisor, material de fabricació i el seu gramatge...) i d'aquesta manera poder dictaminar en un futur quin és el millor tipus de paper per la mesura de pH a través de la metodologia presentada en aquest estudi, evitant que la tortuositat del substrat utilitzat sigui un factor rellevant en l'anàlisi de la difusió.

### **Estudi de l'aplicabilitat industrial del mètode**

Tant el disseny dels sensors com el del mecanisme de sincronització s'han concebut per la realització del present estudi, el qual és de caràcter científic i de recerca. Per aquesta aplicació en concret, ha estat un sistema que ha donat bons resultats.

Tanmateix, seria interessant analitzar profundament la seva aplicació a nivell industrial, on el testeig i lectura del pH de les substàncies es pogués dur a terme en una escala major i d'aquesta manera abastar un nombre més elevat de proves.

Cal destacar que a l'hora de realitzar aquest estudi, s'ha ideat un sistema de mesura de pH de tipus *point of care*, en el qual es busca per sobre de tot la seva aplicació a qualsevol lloc sense ser necessària una gran inversió. Tanmateix, seria interessant comprovar la seva aplicació industrial tant tècnicament com econòmicament, ja que de ser així això permetria a les empreses reduir costos respecte d'altres sistemes de microfluídica de cost, manteniment i operativitat més "complicats".

Destacar-ne sobretot la viabilitat econòmica de la seva aplicació, ja que per tal de poder-se aplicar a nivell industrial haurien d'implantar-se uns canvis mínims respecte al funcionament del mecanisme (aquest hauria de deixar de ser manual) per tal que la seva aplicació fos factible, igual que hauria de continuar essent econòmicament atractiu.



A més, tot i ser un tipus d'estudi emergent en el camp de la salut (ús de paper), creiem que es tracta d'una metodologia d'anàlisi que encara es troba en desenvolupament i del que es pot extreure un major potencial en els camps de la investigació.

Cal recordar que per al present estudi els sensors de pH s'utilitzen com a dispositius de mesura de pH, però podrien ser aplicables per altres funcions, com ara l'anàlisi d'orina per la detecció d'infeccions.

### **Incidència de variables secundàries**

Per estudis futurs seria molt profitós poder aprofundir en la incidència de les condicions ambientals del testeig dels dispositius de mesura, així com en el seu emmagatzematge.

En la realització de l'estudi, ens adonem de la importància de les condicions d'assaig en la realització del nostre estudi, sobretot en la humitat present en l'ambient en el moment de realitzar les proves experimentals, així com en el seu emmagatzematge, poden variar les característiques físiques del material amb el pas del temps. Fins i tot, per tal de malmetre el mínim els sensors, es comencen a utilitzar planxes especialitzades per al seu aplanat, ja que l'aplanat amb planxes convencionals pot afectar les característiques físiques del substrat.

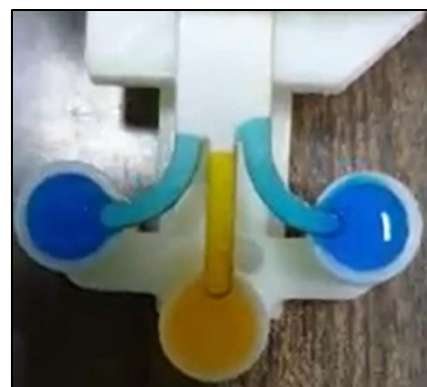
Seria molt profitós en estudis futurs analitzar el protocol de testeig estandarditzat en el present estudi i aprofundir en els aspectes de transport i emmagatzematge dels mateixos per tal de minimitzar la incidència d'aquestes variables.

Per altra banda, es podria realitzar la planificació dels talls làser, tallant únicament els sensors que es requereixin per un dia d'assaig en concret, ja que si es guarden durant un temps prolongat, els dispositius de mesura poden patir canvis de les seves característiques físiques, pel que no es podria realitzar la comparació directa de les proves consecutives.

### **Anàlisi profund del comportament de sensors amb conductes laterals tangents al central**

Tot i que s'han realitzat algunes proves experimentals de sensors amb conductes laterals tangents al central, no s'ha aprofundit en l'estudi del seu comportament principalment degut a la necessitat de generar una funció UDF al *software* de prototipatge, per tal de definir la trajectòria del flux a través dels conductes laterals.

A més, a les proves experimentals no s'han obtingut resultats òptims pel que fa a la sincronització del contacte substrat-reactiu, tal com es mostra a la il·lustració 50, a causa de la diferència de llargària dels conductes laterals vers el central.



*Il·lustració 50: Asincronisme mostrat per un sensor amb conductes laterals inclinats respecte del central en una de les proves realitzades – Font: López Martínez, Joan Antoni*

Tanmateix, amb motiu de la tangència presentada pels conductes laterals, es creu que els reactius que circulin pels *inlets* laterals difondrien de millor manera amb el colorant central a causa de la direcció pràcticament “vertical” amb la qual arriben a la zona central del substrat els reactius que circulen pels conductes laterals.

Així doncs, en estudis futurs es podria aprofundir en l'estudi del comportament de sensors que presenten la característica esmentada anteriorment, incorporant-los a les simulacions tenint en compte la seva trajectòria per mitjà d'una funció UDF, la qual suposaria una tasca de configuració de les simulacions de major complexitat.

## 12. Bibliografia

### 12.1 Referències bibliogràfiques citades

- A Guide to Whatman Filter Paper Grades* - Cytiva (formerly GE Healthcare Life Sciences). (n.d.). Retrieved April 20, 2020, from <https://www.cytivalifesciences.com/en/us/solutions/lab-filtration/knowledge-center/a-guide-to-whatman-filter-paper-grades>
- Bouhadda, I., De Sagazan, O., & Le Bihan, F. (2014). Electronic sensor for pH measurements in nanoliters. *Procedia Engineering*, 87, 915–918. <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2014.11.304>
- Casals-Terré, J., Farré-Lladós, J., López, J. A., Vidal, T., & Roncero, M. B. (2020). Enhanced fully cellulose based forward and reverse blood typing assay. *Journal of Biomedical Materials Research - Part B Applied Biomaterials*, 108(2), 439–450. <https://doi.org/10.1002/jbm.b.34400>
- Casals-Terré, J., Farré-Lladós, J., Zuñiga, A., Roncero, M. B., & Vidal, T. (2019). Novel applications of nonwood cellulose for blood typing assays. *Journal of Biomedical Materials Research - Part B Applied Biomaterials*, 107(5), 1533–1541. <https://doi.org/10.1002/jbm.b.34245>
- Cfd, M. E. N. (2018). *AND EVALUATION OF A BI-STABLE MICRO-DIVERTER VALVE*. 8(June), 77–84.
- Darcy (unit) - Wikipedia. (n.d.). Retrieved April 20, 2020, from [https://en.wikipedia.org/wiki/Darcy\\_\(unit\)](https://en.wikipedia.org/wiki/Darcy_(unit))
- Du Plessis, E., & Woudberg, S. (2009). Modelling of diffusion in porous structures. *WIT Transactions on Engineering Sciences*, 63, 399–408. <https://doi.org/10.2495/MPF090341>
- Fazin, M., Palikandy, K., & Piehl, S. H. (2019). *Master 's Degree Thesis IP501909 MSc Thesis , discipline-oriented master Numerical analysis of water absorption from hydraulic oil flow using cellulose porous media*. June.
- Giri, B. (2017). Laboratory methods in microfluidics. In *Laboratory Methods in Microfluidics*.
- Jang, I., Kim, G., & Song, S. (2018). Mathematical model for mixing in a paper-based channel and applications to the generation of a concentration gradient. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 120, 830–837. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.12.078>
- Martinez, A. W., Phillips, S. T., Butte, M. J., & Whitesides, G. M. (2007). Patterned paper as a platform for inexpensive, low-volume, portable bioassays. *Angewandte Chemie - International Edition*. <https://doi.org/10.1002/anie.200603817>
- MicroTAS2020\_AbstractTemplate\_PaperBased Microfluidics*. (n.d.).
- Nishiyama, N., & Yokoyama, T. (2017). Permeability of porous media: Role of the critical pore size. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 122(9), 6955–6971. <https://doi.org/10.1002/2016JB013793>
- Osborn, J. L., Marshall, L., Holstein, C., Ball, C., Lutz, B., Fu, E., & Yager, P. (2011). A SELF-REFERENCING PAPER T-SENSOR FOR ANALYTE DETECTION. 479–481.

*Portable 3D-printed sensor to measure ionic strength and pH in buffered and non-buffered solutions* Pouya Mehrdel. (2020). January.

Tanpichai, S., Witayakran, S., Srimarut, Y., Woraprayote, W., & Malila, Y. (2019). Porosity, density and mechanical properties of the paper of steam exploded bamboo microfibers controlled by nanofibrillated cellulose. *Journal of Materials Research and Technology*, 8(4), 3612–3622. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2019.05.024>

*The Chicago Manual of Style*. (n.d.). Retrieved April 20, 2020, from <https://www.chicagomanualofstyle.org/home.html>

UNE 57066-2:1986 *Papel y cartón. Determinación de la permeabil...* (n.d.). Retrieved April 20, 2020, from <https://www.une.org/encuentra-tu-norma/busca-tu-norma/norma?c=N0006184>

Yazdchi, K., Srivastava, S., & Luding, S. (2011). On the validity of the carman-kozeny equation in random fibrous media. *Particle-Based Methods II - Fundamentals and Applications*, 264–273.

## 12.2 Referències bibliogràfiques consultades

ANSYS Fluent Tutorial Guide 18. (2018). ANSYS Fluent Tutorial Guide 18. ANSYS *Fluent Tutorial Guide 18*, 15317(April), 724–746. [https://doi.org/10.1016/0140-3664\(87\)90311-2](https://doi.org/10.1016/0140-3664(87)90311-2)

ANSYS, I. (2018). *Fluent 19.1 Tutorial Guide*. 3304(November), 724–746.

Domaingo, A., Langmayr, D., Somogyi, B., & Almbauer, R. (2016). A Semi-implicit Treatment of Porous Media in Steady-State CFD. *Transport in Porous Media*, 112(2), 451–466. <https://doi.org/10.1007/s11242-016-0657-3>

Gomez, N; Molleda, C; Villar, J. C.; Quiles, R; Ferreira, P. (2010). Influencia De La Composición Fibrosa Y Las Propiedades Estructurales Del Papel Prensa En La Densidad De La De Impresión Y La Capacidad De Secado. *XXI Encontro Nacional Da TECNICEIPA*.

Hamraoui, A., & Nylander, T. (2002). Analytical approach for the Lucas-Washburn equation. *Journal of Colloid and Interface Science*, 250(2), 415–421. <https://doi.org/10.1006/jcis.2002.8288>

Kirdponpattara, S., Phisalaphong, M., & Newby, B. min Z. (2013). Applicability of Washburn capillary rise for determining contact angles of powders/porous materials. *Journal of Colloid and Interface Science*, 397, 169–176. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2013.01.033>

Li, K., Zhang, D., Bian, H., Meng, C., & Yang, Y. (2015). Criteria for applying the lucas-washburn law. *Scientific Reports*, 5(November). <https://doi.org/10.1038/srep14085>

Liu, W., Yang, L., & Lv, X. (2015). High-permeability filter paper prepared from pulp fiber treated in NaOH/urea/thiourea system at low temperature. *BioResources*, 10(3), 5620–5632. <https://doi.org/10.15376/biores.10.3.5620-5632>

Liu, Z., Hu, J., Zhao, Y., Qu, Z., & Xu, F. (2015). Experimental and numerical studies on liquid wicking into filter papers for paper-based diagnostics. *Applied Thermal Engineering*, 88, 280–287. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2014.09.057>

Martínez, D. O., Mera, J. A., Córdoba, C., & Ruíz, J. O. (2012). Sistema optoelectrónico de medida de pH para sensores de película delgada. *Ingenium*, 13(26), 107–115. <https://dialnet.unirioja.es/descarga/articulo/5038426.pdf>

- Nair, P. (2014). Whatman Price Catalog. *General Electric Company*, April. [www.whatman.com](http://www.whatman.com)
- Parlamento Europeo, C. de la U. E. (2018). Directiva (UE) 2018/851 del Parlamento Europeo y el Consejo de 30 de mayo de 2018 por la que se modifica la Directiva 2008/98/CE sobre los residuos. *Diario Oficial de La Unión Europea. Serie L*, 150, 14 de junio, 109–140. <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/ES/TXT/PDF/?uri=CELEX:32018L0851&from=EN>
- Rasi, M. (2013). *Permeability Properties of Paper*. PhD thesis, University of Jyväskylä, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Department of Physics, Jyväskylä (Vol. 1, Issue 13).
- Rossow, U. (2001). Optical characterization of porous materials. *Physica Status Solidi (A) Applied Research*, 184(1), 51–78. [https://doi.org/10.1002/1521-396X\(200103\)184:1<51::AID-PSSA51>3.0.CO;2-Q](https://doi.org/10.1002/1521-396X(200103)184:1<51::AID-PSSA51>3.0.CO;2-Q)
- Soudijn, M. L. (2012). *Proton Transport in Aqueous Ionic Solutions*. 85. <https://doi.org/Master Thesis>
- Terrassa, F. (n.d.). *Tall Làser - BCN3D Ignis*. 0–2.
- Zhang, H., Wang, J., & Ye, S. (2008). Prediction of soluble solids content, firmness and pH of pear by signals of electronic nose sensors. *Analytica Chimica Acta*, 606(1), 112–118. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2007.11.003>

### 13. Webgrafia

- Equipament Fabricació Digital* | *fablabterrassa*. (n.d.). Retrieved January 2, 2020, from <http://fablabterrassa.org/equips-fablab/>
- Qué es el pH, cómo se mide y cómo escoger pHmetro* | *LabProcess*. (n.d.). Retrieved January 5, 2020, from <https://www.labprocess.es/noticias/que-es-el-ph-y-como-se-mide>
- Citar i elaborar la bibliografia* | *Bibliotècnica*. (n.d.). Retrieved January 11, 2020, from <https://biblioteca.upc.edu/investigadors/citar-elaborar-bibliografia#citar-text-sistema-numeric>
- ANSYS FLUENT 12.0 User's Guide - 7.2.3 Porous Media Conditions*. (n.d.). Retrieved January 31, 2020, from <https://www.afs.enea.it/project/neptunius/docs/fluent/html/ug/node233.htm>
- Whatman™ 1005-110 Grade 5 Qualitative Filter Paper, Diameter: 11cm, Pore Si.* (n.d.). Retrieved April 19, 2020, from <https://www.capitolscientific.com/Whatman-1005-110-Grade-5-Qualitative-Filter-Paper-Diameter-11cm-Pore-Size-2-5m-Pack-of-100>
- Washburn's equation* - *Wikipedia*. (n.d.). Retrieved February 10, 2020, from [https://en.wikipedia.org/wiki/Washburn%27s\\_equation](https://en.wikipedia.org/wiki/Washburn%27s_equation)
- Phys. Rev. 17, 273 (1921) - The Dynamics of Capillary Flow*. (n.d.). Retrieved February 10, 2020, from <https://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRev.17.273>
- (UNE 57066-2:1986 Papel y cartón. Determinación de la permeabil..., n.d.)* Retrieved April 4, 2020 from <https://www.une.org/encuentra-tu-norma/busca-tu-norma/norma?c=N0006184>
- (A Guide to Whatman Filter Paper Grades - Cytiva (formerly GE Healthcare Life Sciences), n.d.)* Retrieved April 5, 2020 from <https://www.cytivalifesciences.com/en/us/solutions/lab-filtration/knowledge-center/a-guide-to-whatman-filter-paper-grades>
- (Darcy (unit) - Wikipedia, n.d.)* Retrieved April 7, 2020 from [https://en.wikipedia.org/wiki/Darcy\\_\(unit\)](https://en.wikipedia.org/wiki/Darcy_(unit))
- (The Chicago Manual of Style, n.d.)* Retrieved April 18, 2020 from <https://www.chicagomanualofstyle.org/home.html>
- Hagen–Poiseuille equation* - *Wikipedia*. (n.d.). Retrieved April 19, 2020, from [https://en.wikipedia.org/wiki/Hagen–Poiseuille\\_equation](https://en.wikipedia.org/wiki/Hagen–Poiseuille_equation)
- Navier–Stokes equations* - *Wikipedia*. (n.d.). Retrieved April 19, 2020, from [https://en.wikipedia.org/wiki/Navier–Stokes\\_equations](https://en.wikipedia.org/wiki/Navier–Stokes_equations)
- Constitutive equation* - *Wikipedia*. (n.d.). Retrieved April 19, 2020, from [https://en.wikipedia.org/wiki/Constitutive\\_equation](https://en.wikipedia.org/wiki/Constitutive_equation)
- Darcy (unit) - Wikipedia. (n.d.)*. Retrieved April 20, 2020, from [https://en.wikipedia.org/wiki/Darcy\\_\(unit\)](https://en.wikipedia.org/wiki/Darcy_(unit))
- Odd units on UDS for Isotropic Diffusion -- CFD Online Discussion Forums*. (n.d.). Retrieved May 26, 2020, from <https://www.cfd-online.com/Forums/fluent/83931-odd-units-uds-isotropic-diffusion.html>



